

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

MATHEUS ROLIM SALES

DINÂMICA DOS NÍVEIS DE ENERGIA DO BILHAR DE SINAI DESSIMETRIZADO  
E SUA RELAÇÃO COM BILHARES TRIANGULARES

CURITIBA

2020

MATHEUS ROLIM SALES

DINÂMICA DOS NÍVEIS DE ENERGIA DO BILHAR DE SINAI DESSIMETRIZADO  
E SUA RELAÇÃO COM BILHARES TRIANGULARES

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná como requisito para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz.

CURITIBA

2020

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR  
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

S163d

Sales, Matheus Rolim

Dinâmica dos níveis de energia do bilhar de Sinai dessimetrizado e sua relação com bilhares triangulares [recurso eletrônico] / Matheus Rolim Sales. – Curitiba, 2020.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física, 2020.

Orientador: Marcos Gomes Eleutério da Luz.

1. Métodos de elementos de contorno. 3. Solitons. 4. Teoria quântica. 5. Dinâmica da partícula. I. Universidade Federal do Paraná. II. Luz, Marcos Gomes Eleutério da. III. Título.

CDD: 531.163

Bibliotecária: Vanusa Maciel CRB- 9/1928



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO FÍSICA - 40001016020P4


### TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **MATHEUS ROLIM SALES** intitulada: **"Dinâmica dos níveis de energia do bilhar de Sinai dessimetrizado e sua relação com bilhares triangulares"**, sob orientação do Prof. Dr. **MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ**, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua aprovação no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 13 de Fevereiro de 2020.

  
MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ  
Presidente da Banca Examinadora (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

  
MARLUS KOEHLER  
Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

  
JOSÉ DANILLO SZEZECH JUNIOR  
Avaliador Interno (UNIVERSIDADE ESTADUAL DE PONTA GROSSA)



# AGRADECIMENTOS

À minha mãe, por todo o amor e incentivo que ela me deu. Sem ela nada disso seria possível.

Aos professores Marcos Gomes Eleutério da Luz e Fabio Marcel Zanetti pelo o que aprendi com eles e por acompanharem meu trabalho desde a Iniciação Científica.

Ao Programa de Pós-Graduação em Física da UFPR e ao secretário Leandro Florentino pela atenção no esclarecimento de todas as dúvidas.

Aos membros da pré-banca e banca de defesa pelas sugestões e comentários.

Ao CNPq pelo apoio financeiro.

*“Wit beyond measure is man’s greatest treasure”*  
*(J. K. Rowling)*

# RESUMO

Neste trabalho estudamos numericamente a dinâmica dos níveis de energia do bilhar de Sinai totalmente dessimetrizado e sua relação com as autofunções do bilhar triângulo retângulo. Utilizamos o Método de Contorno de Paredes (MCP) para determinar o espectro de energias e as autofunções correspondentes através da análise das propriedades da matriz  $T$ , objeto principal de estudo do MCP, que carrega informações acerca das autoenergias, da geometria e das simetrias do sistema. Obtivemos a dinâmica dos níveis de energia como função dos ângulos internos e do raio do bilhar, e verificamos que todos os autoestados do bilhar de Sinai dessimetrizado estão associados a autofunções do triângulo retângulo. Verificamos também a existência de estruturas do tipo sóliton no espectro de energias para estes dois casos e que elas são geradas por funções de onda cicatrizadas. A longevidade de cada sóliton está relacionada com a morfologia da sua função de onda correspondente.

**Palavras-chaves:** Dinâmica dos níveis de energia. Bilhar de Sinai. Método de Contorno de Paredes.

# ABSTRACT

In this work we study numerically the level dynamics of the deformed Sinai billiard and its connexion with the eigenfunctions of the right triangle billiard. We use the Boundary Wall Method (BWM) to determine the spectrum and the corresponding eigenstates by analyzing the properties of the  $T$  matrix, the BWM main object of study, which possesses informations about the system's eigenenergies, geometry and symmetries. We determined the level dynamics as function of the inner angles and the radius of the billiard, and we found that all the eigenstates of the deformed Sinai billiard are associated to eigenfunctions of the right triangle billiard. We also found the existence of solitonlike structures in the energy spectrum for these two cases and that they are generated by scarred wave functions. The longevity of each solitonlike structure is related with the morphology of its corresponding wave function.

**Key-words:** Level dynamics. Sinai billiard. Boundary Wall Method.

# LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Exemplos de alguns bilhares conhecidos na literatura. (a) bilhar quadrado e bilhar triângulo retângulo (linha tracejada), cuja dinâmica é regular para os ângulos $45^\circ$ – $45^\circ$ – $90^\circ$ e $30^\circ$ – $60^\circ$ – $90^\circ$ ; (b) bilhar circular; (c) bilhar triângulo equilátero; (d) bilhar de Sinai; (e) bilhar estádio de Bunimovich; e (f) bilhar triangular genérico. . . . .	15
Figura 2 – Exemplo de um bisóliton para uma família de Hamiltonianos da forma $H_0 + \tau V$ , retirado de [33], onde no eixo vertical está indicado os níveis de energia em ordem crescente e no eixo horizontal o parâmetro $\tau$ . . . .	18
Figura 3 – Exemplos de estados cicatrizados do bilhar estádio de Bunimovich, retirado de [43]. . . . .	19
Figura 4 – Representação esquemática de um dos passos do processo de espalhamento na regiões interna (esquerda) e externa (direita). A soma de todas as contribuições deste tipo levam a onda espalhada ao ponto $\mathbf{r}$ . .	26
Figura 5 – Discretização de uma fronteira arbitrária $\mathcal{C}$ . . . . .	28
Figura 6 – (a) bilhar quadrado e (b) bilhar triângulo retângulo. . . . .	31
Figura 7 – Gráfico da média dos elementos da matriz $T$ , com excessão dos elementos da diagonal em função do número de onda $k$ . Os picos de $T$ representam autoestados do sistema interno e altura dos picos não possui relevância física, uma vez que no limite $N \rightarrow \infty$ a altura tende a infinito, o que está associado à divergência da função de Green. (a) Primeiras ressonâncias do bilhar quadrado, com os cinco primeiros autoestados $(n_x, n_y)$ indicados. (b): picos da matriz $T$ referentes aos estados exibidos nas figuras 9, 10 e 11. . . . .	32
Figura 8 – (a) e (b): gráficos de densidade de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para (a) $k = 64,55$ e $\theta = 90^\circ$ e (b): $k = 64,4749$ ( $n_x = 14$ , $n_y = 15$ ) e $\theta = 20^\circ$ . (c): gráfico de densidade de $ T ^2$ para $k = 64,55$ . . . . .	33
Figura 9 – (a) e (b): gráficos de densidade de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $k = 64,4749$ ( $n_x = 14$ , $n_y = 15$ ) com (a) $\theta = 43,02^\circ$ e (b): $\theta = 46,97^\circ$ . (c): gráfico de densidade de $ T ^2$ . . . . .	33
Figura 10 – (a) e (b): gráficos de densidade de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $k = 64,7041$ ( $n_x = 10$ , $n_y = 18$ ) com (a) $\theta = 29,05^\circ$ e (b): $\theta = 60,95^\circ$ . (c): gráfico de densidade de $ T ^2$ . . . . .	34
Figura 11 – (a) e (b): gráficos de densidade de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $k = 64,7805$ ( $n_x = 13$ , $n_y = 16$ ) com (a) $\theta = 30,09^\circ$ e (b): $\theta = 50,91^\circ$ . (c): gráfico de densidade de $ T ^2$ . . . . .	34

Figura 12 – Gráfico da média dos elementos da matriz $T$ , com excessão dos elementos da diagonal em função do número de onda $k$ . Os três primeiros autoestados $(n_x, n_y)$ estão indicados em (a). Os picos correspondentes aos estados exibidos nas figuras 15, 16 e 17 estão indicados em (b). . . . .	35
Figura 13 – Gráfico da média espacial de $\psi(\mathbf{r})$ em função do ângulo de incidência $\theta$ para $k = 64,7146$ . O pico de maior intensidade está localizado em $\theta = 299^\circ$ . . . . .	35
Figura 14 – Gráficos de densidade de (a) $ \psi(\mathbf{r}) $ e (b) $ T ^2$ para $k = 64,60$ . . . . .	36
Figura 15 – Gráficos de densidade de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) $ T ^2$ para $k = 64,4854$ ( $n_x = 14$ , $n_y = 15$ ) e $\theta = 315^\circ$ . . . . .	36
Figura 16 – Gráficos de densidade de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) $ T ^2$ para $k = 64,7146$ ( $n_x = 10$ , $n_y = 18$ ) e $\theta = 299^\circ$ . . . . .	36
Figura 17 – (a)-(c): gráficos de densidade de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ com (a) $\theta = 321^\circ$ , (b) $\theta = 346^\circ$ e (c) $\theta = 337^\circ$ ; (d) gráfico de densidade de $ T ^2$ . Em todos os casos $k = 64,7910$ ( $n_x = 13$ , $n_y = 16$ ). . . . .	37
Figura 18 – Gráficos de densidade de $ \Psi_{n_x, n_y}(\mathbf{r}) ^2$ com (a) $(n_x, n_y) = (14, 15)$ , (b) $(n_x, n_y) = (10, 18)$ , (c) $(n_x, n_y) = (13, 16)$ , (d) $(n_x, n_y) = (5, 20)$ , (e) $(n_x, n_y) = (8, 19)$ . . . . .	37
Figura 19 – (a) Representação esquemática do comportamento da luz no plano $x - z$ do dispositivo. (c) Gráficos de densidade das distribuições de campo simuladas, na região indicada em (b), para uma onda plana incidente de $\lambda = d = 500$ nm. Os painéis representam no sentido anti-horário: $s = 15d$ , $s = 40d$ , $s = 50d$ e $s = 30d$ . Figura retirada de [62]. . . . .	39
Figura 20 – O bilhar de Sinai consiste em um quadrado com um disco de raio $r$ em seu centro. As linhas pontilhadas correspondem às linhas de simetria do bilhar e $\hat{\mathbf{k}}$ e $\theta$ são o versor de onda da onda incidente e seu ângulo de incidência, respectivamente. . . . .	41
Figura 21 – Gráfico dos picos de $\langle  T(s_b, s_a)  \rangle$ como função de $k$ e $\alpha$ com $r = 0,2$ . A região sombreada em (a) está exibida na figura 22 e as regiões sombreadas na figura (b) estão exibidas nas figuras 23 (esquerda) e 24 (direita). . . . .	42



Figura 22 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $\alpha$  com  $r = 0,2$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 67,5999$  e  $\alpha = 44,2^\circ$ ; (b)  $k = 67,5594$  e  $\alpha = 44,5^\circ$ ; (c)  $k = 67,5129$  e  $\alpha = 45,1^\circ$ ; (d)  $k = 67,7735$  e  $\alpha = 44,15^\circ$ ; (e)  $k = 67,8528$  e  $\alpha = 44,7^\circ$ ; (f)  $k = 67,8305$  e  $\alpha = 44,15^\circ$ ; (g)  $k = 67,8648$  e  $\alpha = 44,3^\circ$ ; (h)  $k = 67,9106$  e  $\alpha = 44,7^\circ$ ; (i)  $k = 67,9017$  e  $\alpha = 44,15^\circ$ ; (j)  $k = 67,9767$  e  $\alpha = 44,5^\circ$ ; (k)  $k = 68,0029$  e  $\alpha = 44,7^\circ$ ; (l)  $k = 68,0150$  e  $\alpha = 45,25^\circ$ ; (m)  $k = 68,1603$  e  $\alpha = 44,15^\circ$ ; (n)  $k = 68,0772$  e  $\alpha = 44,7^\circ$  e (o)  $k = 68,1970$  e  $\alpha = 45,25^\circ$ . . . . . 43

Figura 23 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $\alpha$  com  $r = 0,2$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 98,2296$  e  $\alpha = 44,05^\circ$ ; (b)  $k = 98,4477$  e  $\alpha = 44,25^\circ$ ; (c)  $k = 98,5315$  e  $\alpha = 44,33^\circ$ ; (d)  $k = 98,6547$  e  $\alpha = 44,45^\circ$ ; (e)  $k = 98,7041$  e  $\alpha = 44,5^\circ$ ; (f)  $k = 98,8878$  e  $\alpha = 44,7^\circ$ ; (g)  $k = 98,9670$  e  $\alpha = 44,8^\circ$ ; (h)  $k = 99,0150$  e  $\alpha = 45,1^\circ$ ; (i)  $k = 98,8820$  e  $\alpha = 44,05^\circ$ ; (j)  $k = 99,0753$  e  $\alpha = 44,38^\circ$ ; (k)  $k = 99,2017$  e  $\alpha = 44,7^\circ$  e (l)  $k = 99,1860$  e  $\alpha = 45,05^\circ$ . 44

Figura 24 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $\alpha$  com  $r = 0,2$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 101,338$  e  $\alpha = 44,1^\circ$ ; (b)  $k = 101,403$  e  $\alpha = 44,15^\circ$ ; (c)  $k = 101,476$  e  $\alpha = 44,22^\circ$ ; (d)  $k = 101,672$  e  $\alpha = 44,4^\circ$ ; (e)  $k = 101,876$  e  $\alpha = 44,6^\circ$ ; (f)  $k = 102,138$  e  $\alpha = 44,93^\circ$ ; (g)  $k = 102,039$  e  $\alpha = 44,2^\circ$ ; (h)  $k = 102,207$  e  $\alpha = 44,5^\circ$  e (i)  $k = 102,297$  e  $\alpha = 44,93^\circ$ . . . . . 45

Figura 25 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $\alpha$  com  $r = 0,2$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 98,9670$  e  $\alpha = 44,8^\circ$ ; (b)  $k = 99,0007$  e  $\alpha = 44,85^\circ$ ; (c)  $k = 99,0283$  e  $\alpha = 44,9^\circ$ ; (d)  $k = 99,0450$  e  $\alpha = 44,95^\circ$ ; (e)  $k = 99,0470$  e  $\alpha = 44,975^\circ$ ; (f)  $k = 99,0447$  e  $\alpha = 45,0^\circ$ ; (g)  $k = 99,0323$  e  $\alpha = 45,05^\circ$ ; (h)  $k = 99,0150$  e  $\alpha = 45,1^\circ$ ; (i)  $k = 99,1185$  e  $\alpha = 44,8^\circ$ ; (j)  $k = 99,1110$  e  $\alpha = 44,85^\circ$ ; (k)  $k = 99,1042$  e  $\alpha = 44,9^\circ$ ; (l)  $k = 99,1012$  e  $\alpha = 44,95^\circ$ ; (m)  $k = 99,1032$  e  $\alpha = 44,975^\circ$ ; (n)  $k = 99,1075$  e  $\alpha = 45,0^\circ$ ; (o)  $k = 99,1165$  e  $\alpha = 45,05^\circ$  e (p)  $k = 99,1232$  e  $\alpha = 45,1^\circ$ . . . . . 46

Figura 26 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  como função de  $k$  e  $\alpha$  com (a)  $r = 0,0$ , (b)  $r = 0,1$  e (c)  $r = 0,2$ . . . . . 47

- Figura 27 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $\alpha$  para diferentes valores de raio:  $r_A = 0,0$ ,  $r_B = 0,1$  e  $r_C = 0,2$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 65,5931$  e  $\alpha = 43,9^\circ$ ; (b)  $k = 65,8763$  e  $\alpha = 44,4^\circ$ ; (c)  $k = 66,0740$  e  $\alpha = 45^\circ$ ; (d)  $k = 65,9246$  e  $\alpha = 45,5^\circ$ ; (e)  $k = 65,5340$  e  $\alpha = 46,2^\circ$ ; (f)  $k = 65,2702$  e  $\alpha = 43,8^\circ$ ; (g)  $k = 65,6166$  e  $\alpha = 44,4^\circ$ ; (h)  $k = 65,4992$  e  $\alpha = 45,8^\circ$ ; (i)  $k = 64,9623$  e  $\alpha = 46,6^\circ$ ; (j)  $k = 64,8522$  e  $\alpha = 44,4^\circ$ ; (k)  $k = 65,0315$  e  $\alpha = 44,8^\circ$ ; (l)  $k = 65,0060$  e  $\alpha = 45,8^\circ$  e (m)  $k = 64,4268$  e  $\alpha = 46,8^\circ$ . . . . . 48
- Figura 28 – Gráficos dos picos de  $\langle T(s_b, s_a) \rangle$  como função de  $k$  e  $r$  com (a)  $\alpha = 44^\circ$ , (b)  $\alpha = 45^\circ$  e (c)  $\alpha = 46^\circ$ . . . . . 49
- Figura 29 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $r$  para  $\alpha = 44^\circ$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 64,5051$  e  $r = 0,0$ ; (b)  $k = 64,3278$  e  $r = 0,084$ ; (c<sub>1</sub>) e (c<sub>2</sub>)  $k = 64,0464$  e  $r = 0,129$ ; (d)  $k = 63,8769$  e  $r = 0,16$ ; (e)  $k = 64,6349$  e  $r = 0,187$ ; (f)  $k = 64,6642$  e  $r = 0,0$ ; (g)  $k = 64,4572$  e  $r = 0,09$ ; (h)  $k = 64,1936$  e  $r = 0,138$ ; (i)  $k = 63,9751$  e  $r = 0,169$ ; (j)  $k = 64,8100$  e  $r = 0,0$ ; (k)  $k = 64,5515$  e  $r = 0,102$ ; (l)  $k = 64,3098$  e  $r = 0,144$ ; (m)  $k = 64,8520$  e  $r = 0,0$ ; (n)  $k = 64,6435$  e  $r = 0,094$ ; (o)  $k = 64,8683$  e  $r = 0,0$  e (p)  $k = 64,923$  e  $r = 0,058$ . . . . . 50
- Figura 30 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $r$  para  $\alpha = 45^\circ$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 64,4804$  e  $r = 0,0$ ; (b)  $k = 64,3089$  e  $r = 0,083$ ; (c)  $k = 64,0927$  e  $r = 0,125$ ; (d)  $k = 63,8601$  e  $r = 0,16$ ; (e)  $k = 63,6719$  e  $r = 0,181$ ; (f)  $k = 64,7097$  e  $r = 0,0$ ; (g)  $k = 64,5019$  e  $r = 0,097$ ; (h)  $k = 64,2425$  e  $r = 0,142$ ; (i)  $k = 63,9308$  e  $r = 0,182$ ; (j)  $k = 64,7857$  e  $r = 0,0$ ; (k)  $k = 64,4911$  e  $r = 0,108$ ; (l)  $k = 64,5263$  e  $r = 0,111$ ; (m)  $k = 64,8407$  e  $r = 0,061$ ; (n)  $k = 64,2125$  e  $r = 0,153$  e (o)  $k = 64,0231$  e  $r = 0,189$ . 51
- Figura 31 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $r$  para  $\alpha = 46^\circ$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 64,5049$  e  $r = 0,0$ ; (b)  $k = 64,2943$  e  $r = 0,093$ ; (c)  $k = 64,0881$  e  $r = 0,131$ ; (d)  $k = 63,8871$  e  $r = 0,16$ ; (e)  $k = 63,5579$  e  $r = 0,199$ ; (f)  $k = 64,6642$  e  $r = 0,0$ ; (g)  $k = 64,8100$  e  $r = 0,0$ ; (h)  $k = 64,7206$  e  $r = 0,06$ ; (i)  $k = 64,4905$  e  $r = 0,115$ ; (j)  $k = 64,2475$  e  $r = 0,152$ ; (k)  $k = 63,9808$  e  $r = 0,188$ ; (l)  $k = 64,8519$  e  $r = 0,0$ ; (m)  $k = 64,6945$  e  $r = 0,083$ ; (n)  $k = 64,3062$  e  $r = 0,151$ ; (o)  $k = 64,8683$  e  $r = 0,0$  e (p)  $k = 64,9034$  e  $r = 0,075$ . . . . . 52

- Figura 32 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $r$  para  $\alpha = 44^\circ$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 62,5537$  e  $r = 0,0$ ; (b)  $k = 61,0551$  e  $r = 0,25$ ; (c)  $k = 63,1409$  e  $r = 0,0$ ; (d)  $k = 61,9060$  e  $r = 0,225$ ; (e)  $k = 64,4997$  e  $r = 0,0$ ; (f)  $k = 62,9360$  e  $r = 0,252$ ; (g)  $k = 65,6466$  e  $r = 0,0$ ; (h)  $k = 62,8059$  e  $r = 0,34$ ; (i)  $k = 66,2509$  e  $r = 0,0$ ; (j)  $k = 63,2426$  e  $r = 0,35$ ; (k)  $k = 68,7584$  e  $r = 0,0$ ; (l)  $k = 66,1361$  e  $r = 0,317$ ; (m)  $k = 68,9415$  e  $r = 0,0$ ; (n)  $k = 68,4090$  e  $r = 0,14$  e (o)  $k = 68,6408$  e  $r = 0,162$ . . . . . 53
- Figura 33 – Estados cicatrizados e suas respectivas órbitas periódicas, indicadas pelas linhas tracejadas nas figuras na linha de baixo. . . . . 54
- Figura 34 – Estatísticas da separação dos níveis de energia vizinhos para o bilhar de Sinai com  $r = 0$  para os gráficos à esquerda e  $r = 0,25$  para os gráficos à direita com (a)  $\alpha = 44,0^\circ$ ; (b)  $\alpha = 44,4^\circ$ ; (c)  $\alpha = 45,0^\circ$ ; (d)  $\alpha = 45,6^\circ$  e (e)  $\alpha = 46,0^\circ$ . A linha sólida representa a distribuição de Poisson, dada por (1.1), a linha tracejada representa a distribuição de Wigner, dada por (1.2) e a linha pontilhada representa a distribuição de Brody, dada por (1.3) com (a) e (e)  $q = 0,3386$  e (b) e (d)  $q = 0,1875$ . . . . . 56

# SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>Introdução . . . . .</b>	<b>14</b>
<b>2</b>	<b>O Método de Contorno de Paredes . . . . .</b>	<b>21</b>
2.1	Desenvolvimento analítico do MCP . . . . .	21
2.2	Propriedades da matriz $T$ . . . . .	25
2.3	Desenvolvimento numérico do MCP . . . . .	28
2.4	Aplicações do MCP . . . . .	31
2.4.1	Bilhar quadrado . . . . .	31
2.4.2	Bilhar triângulo retângulo . . . . .	34
2.4.3	Otimização de cavidades para dispositivos coletores de fótons . . . . .	37
2.5	Histórico das simulações numéricas . . . . .	39
<b>3</b>	<b>Dinâmica dos níveis de energia do bilhar de Sinai . . . . .</b>	<b>41</b>
3.1	Raio fixo, ângulos variáveis . . . . .	42
3.2	Raio variável, ângulos fixos . . . . .	49
3.3	Relação entre os estados cicatrizados e as órbitas periódicas . . . . .	53
3.4	Estatísticas da separação dos níveis de energias vizinhos . . . . .	55
<b>4</b>	<b>Conclusões . . . . .</b>	<b>57</b>
	<b>Referências . . . . .</b>	<b>58</b>

# 1 Introdução

Damos o nome de *problema de bilhar* ao comportamento dinâmico de uma partícula em movimento uniforme confinada em uma região bidimensional plana  $\Omega$  do espaço e delimitada por sua fronteira  $\mathcal{C}$ , onde a partícula sofre colisões elásticas, isto é, a energia cinética e o módulo do seu momento linear são constantes do movimento. Dependendo da forma da fronteira, as propriedades dinâmicas desse tipo de sistema podem variar desde *completamente regular* (sistema integrável), para *completamente caótica* (sistema não-integrável), passando pela dinâmica *mista* (sistema pseudo-integrável), onde dinâmicas regular e caótica coexistem [1]. Se um sistema Hamiltoniano com  $n$  graus de liberdade possuir  $n$  constantes do movimento em involução, isto é, se o parênteses de Poisson entre cada par de constantes do movimento for nulo, então dizemos que o sistema é *integrável* [2] e sua dinâmica está confinada em um torus  $n$ -dimensional no espaço de fase de genus  $g = 1^*$ . Caso contrário, o sistema é *não-integrável*. Existe ainda o caso em que um sistema com  $n$  graus de liberdade possua  $n$  constantes do movimento, mas sua dinâmica esteja confinada em uma superfície de genus  $g > 1$ . Chamamos esses sistemas de *pseudo-integráveis* [4].

Exemplos de bilhares integráveis são os bilhares retangular/quadrado, triângulo retângulo com ângulos internos medindo  $45^\circ$ – $45^\circ$ – $90^\circ$  ou  $30^\circ$ – $60^\circ$ – $90^\circ$ , circular e triângulo equilátero (veja figuras 1(a), 1(b) e 1(c)). Para estes sistemas são conhecidas duas constantes do movimento, onde cada trajetória pode ser prevista para tempos arbitrariamente longos com precisão arbitrária [5]. Porém, se um obstáculo circular for colocado dentro do retângulo (bilhar de Sinai), ou se o círculo for transformado em um estádio (veja figuras 1(d) e 1(e)), isto é, duas retas paralelas onde em ambos os extremos são conectadas a dois semicírculos (bilhar de Bunimovich) ou se nenhum dos ângulos internos do bilhar triangular forem racional com  $\pi$  (veja figura 1(f)), isto é,  $\alpha_i/\pi \neq s/r$ , onde  $s, r \in \mathbb{N}$ , o sistema se torna caótico [6, 7]. Ou seja, pequenas alterações nas condições iniciais da partícula causam divergência exponencial com o tempo de trajetórias vizinhas. Esta característica limita a possibilidade de calcular o comportamento para tempos longos de uma trajetória começando em um certo ponto do espaço de fase. Além disso, o movimento classicamente caótico está relacionado com a perda de constantes do movimento. Do ponto de vista de simetrias, uma constante do movimento implica em um certo tipo de simetria dinâmica, logo, podemos dizer que o movimento caótico ocorre devido à quebra de algumas simetrias. No caso do bilhar de Sinai, ele é devido ao efeito de defocalização da reflexão no obstáculo circular [6]. Já no bilhar de Bunimovich, o caos surge porque as retas destroem a invariância de rotação dos dois semicírculos [7].

---

\*O genus de uma superfície orientável é um número inteiro e representa o número de “buracos” que ela possui [3]. Por exemplo, uma esfera tem genus 0 e um torus tem genus 1.

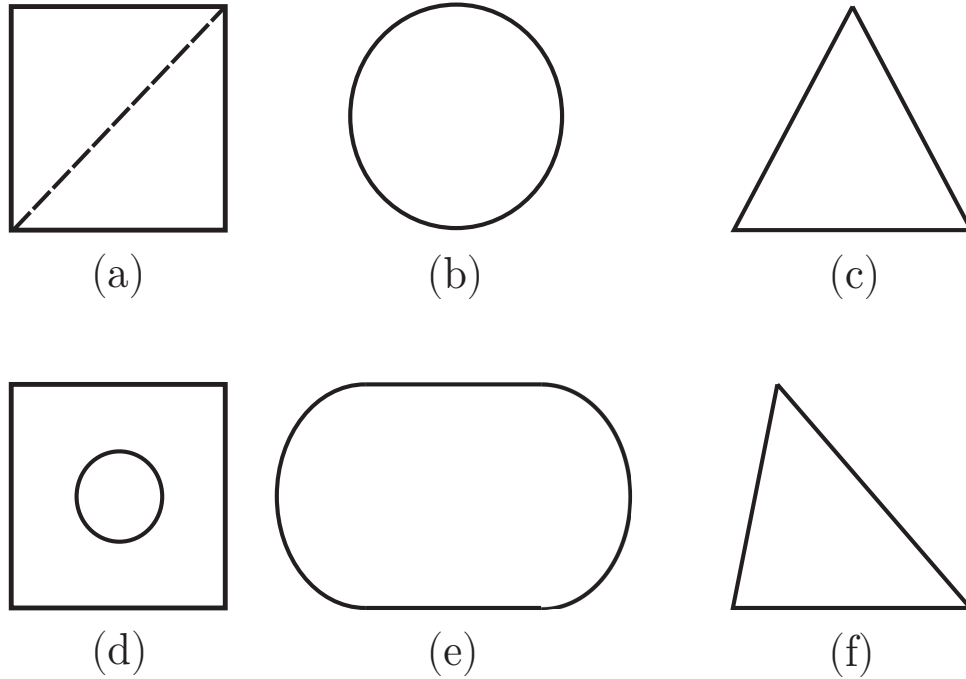


Figura 1 – Exemplos de alguns bilhares conhecidos na literatura. (a) bilhar quadrado e bilhar triângulo retângulo (linha tracejada), cuja dinâmica é regular para os ângulos  $45^\circ$ – $45^\circ$ – $90^\circ$  e  $30^\circ$ – $60^\circ$ – $90^\circ$ ; (b) bilhar circular; (c) bilhar triângulo equilátero; (d) bilhar de Sinai; (e) bilhar estádio de Bunimovich; e (f) bilhar triangular genérico.

Para os sistemas cuja dinâmica é mista, as duas situações descritas acima podem coexistir, e esses casos são chamados de pseudo-integráveis. A dinâmica clássica desses sistemas não é caótica [4, 8], mas a distância entre duas trajetórias vizinhas cresce quadraticamente com o tempo [9]. Os exemplos mais comuns desses sistemas são os bilhares poligonais, dentre eles destaca-se o bilhar triangular com pelo menos um ângulo interno racional com  $\pi$  [10].

Devido ao fato dos bilhares serem um dos sistemas dinâmicos mais simples a apresentar movimento caótico, eles têm sido estudados extensivamente nas últimas décadas, tanto clássica [11, 12] quanto quanticamente [13, 14, 15, 16]. O estudo quântico de bilhares cujos análogos clássicos são caóticos, também chamado de *caos quântico*, proporcionou uma área rica em problemas físicos, tanto teóricos quanto experimentais [17, 18, 19, 20]. No entanto, o *problema de bilhar quântico*, é mais complexo e mais sutil que seu análogo clássico, e seus estudos ainda são recentes sendo que, para certos bilhares, a descrição quântica não é tão bem estabelecida quanto a descrição clássica.

Como visto anteriormente, caos, em geral, se refere à sensibilidade exponencial de uma trajetória clássica no espaço de fase nas condições iniciais. Como na mecânica quântica não é possível definir uma trajetória no espaço de fase, o comportamento dinâmico dos bilhares clássicos se manifesta nas propriedades estatísticas do espectro de energias e/ou nas estruturas das funções de onda correspondentes. Tem sido conjecturado e verificado numericamente que sistemas cuja dinâmica clássica é completamente caótica podem ter



suas características descritas por meio de estatísticas de matrizes aleatórias [21, 22], com a matriz do Hamiltoniano do sistema obedecendo certas simetrias [23].

O estudo da teoria de matrizes aleatórias se desenvolveu quando E. Wigner estudava as estatísticas dos níveis de energia de núcleos de átomos pesados [24]. Ele descobriu que as estatísticas das flutuações dos níveis de energia desses átomos concordavam com as estatísticas das flutuações da densidade de autovalores de acordo com uma distribuição Gaussiana. Surgiram então os ensembles Gaussiano de matrizes aleatórias. São eles: *Gaussian Orthogonal Ensemble* (GOE), *Gaussian Unitary Ensemble* (GUE) e *Gaussian Symplectic Ensemble* (GSE).

Uma das quantidades estatísticas associadas às matrizes aleatórias mais estudadas é a distribuição da separação dos níveis de energias vizinhos  $P(s)$ , onde  $s = E_{n+1} - E_n$ , pois acredita-se que tenha um caráter universal para diferentes tipos de dinâmica. Isto é, para sistemas integráveis  $d$ -dimensionais, o espaçamento entre os níveis seguem a distribuição de Poisson [25]

$$P(s) = e^{-s}, \quad (1.1)$$

que está normalizada para um espaçamento médio unitário. Para esses sistemas são conhecidas  $d$  constantes de movimento dando origem a  $d$  números quânticos. Níveis com números quânticos muito diferentes podem possuir energias coincidentes [25], logo quando  $s \rightarrow 0$ ,  $P(s) \rightarrow 1$ , um fenômeno conhecido como agrupamento de níveis (*level clustering*).

Por outro lado, os sistemas completamente caóticos seguem a distribuição de Wigner [23]

$$P(s) = \frac{\pi}{2} s^\beta e^{-\pi s^2/4}, \quad (1.2)$$

que está normalizada para um espaçamento médio unitário, sendo que  $\beta > 0$  caracteriza os três ensembles Gaussianos existentes. Diferentemente do caso regular, devido ao aumento da caoticidade, algumas constantes do movimento são perdidas, implicando na perda de bons números quânticos e no *mixing* [26] de estados com números quânticos diferentes, logo quando  $s \rightarrow 0$ ,  $P(s) \rightarrow 0$ , ou seja, devido à quebra de simetria, nos pontos onde os níveis cruzavam (caso regular), os estados interagem fortemente e os níveis se repelem (*avoided crossings*) [26]. Os valores de  $\beta$  estão relacionados com o tipo de simetria presente no sistema. Para o GOE, temos que  $\beta = 1$  e as matrizes possuem invariância por reversão temporal e rotacional. As matrizes do GSE possuem invariância por reversão temporal, mas não por invariância rotacional e  $\beta = 4$ . Já as matrizes do GUE, onde  $\beta = 2$ , não possuem invariância por reversão temporal e ainda não foi verificado se há ou não invariância rotacional [21].

No entanto, muitos dos sistemas na natureza não pertencem à nenhuma dessas categorias. Para um sistema genérico, o espaço de fase é misto e vários modelos para a distribuição da separação dos níveis de energias vizinhos foram propostos. Dentre eles os

mais conhecidos são a distribuição de Berry-Robnik [27],

$$P(s) = \frac{1}{\varrho} \frac{d^2}{ds^2} \left[ e^{\varrho s} \prod_{i=2}^N \operatorname{erfc} \left( \frac{\sqrt{\pi}}{2} \varrho_i s \right) \right],$$

onde os autores consideraram o espaço de fase composto por uma região regular e  $N - 1$  regiões caóticas e  $\varrho$  é a densidade média de níveis, e a distribuição de Brody [28],

$$P(s) = \omega(q+1)s^q \exp(-\omega s^{q+1}), \quad (1.3)$$

onde

$$\omega = \left[ \Gamma \left( \frac{q+2}{q+1} \right) \right]^{q+1},$$

obtida através de uma generalização de (1.2).  $q$  quantifica o grau de caoticidade do sistema, sendo que, para  $q = 0$ , temos a distribuição de Poisson e para  $q = 1$ , a distribuição de Wigner. Para valores intermediários de  $q$  a dinâmica é mista.

Além da caracterização da dinâmica de um sistema através da análise da distribuição da separação dos níveis de energias vizinhos, sabe-se que a não-integrabilidade se manifesta também no movimento paramétrico dos autovalores como função de algum um parâmetro presente no Hamiltoniano [29, 30, 31]. A vantagem de estudar esse movimento paramétrico é que podemos observar a dependência dos autovalores em função desse parâmetro externo.

Pechukas [31] e Yukawa [32] mostraram que é possível obter uma analogia entre um gás clássico unidimensional e um sistema quântico perturbado com Hamiltoniano  $H = H_0 + \tau V$ , onde  $H_0$  é o Hamiltoniano do sistema não-perturbado e  $\tau V$  é uma perturbação. Neste caso, a “dinâmica” dos níveis de energia  $E_n(\tau)$  com o parâmetro  $\tau$  é governada pelas mesmas “equações de movimento” que as posições  $x_n(\tau)$  das partículas do gás. Gaspard, Rice e Nakamura [33] mostraram ainda que, para esse mesmo sistema quântico, são observadas diversas estruturas tipo sóliton no espectro de energias conforme o parâmetro  $\tau$  é variado (veja a figura 2). Essas estruturas são formadas por repelências sucessivas de níveis de energia ao longo de uma curva fictícia, o que sugere a persistência de alguma propriedade de um autoestado após diversas repelências [33]. Tais estruturas também foram observadas no espectro de energias do bilhar estádio de Bunimovich [34, 35].

As repelências são exibidas em diagramas onde o espectro de energias é plotado em função de um parâmetro variável como por exemplo: um campo elétrico [36] ou magnético [37] externo, ou a distância interatômica em uma molécula [38] ou algum parâmetro geométrico em um bilhar [35, 39, 40], sendo que para sistemas sem simetrias adicionais, os níveis de energias nunca cruzam, mas aproximam-se um do outro de uma forma irregular. O ponto de menor distância entre eles é chamado de repelência. Conforme o sistema clássico se torna cada vez mais caótico, o número de repelências no espectro quântico aumenta [26, 41, 42], o que se deve à forte interação dos níveis de energia.

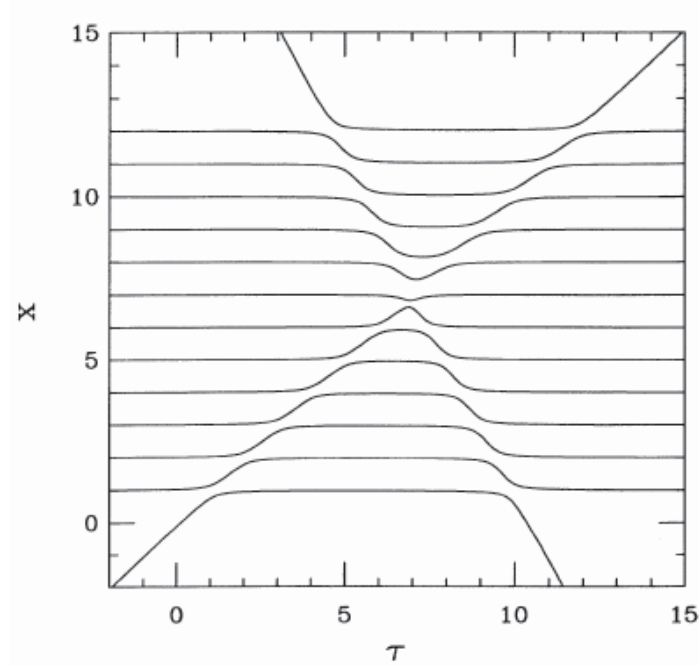


Figura 2 – Exemplo de um bisóliton para uma família de Hamiltonianos da forma  $H_0 + \tau V$ , retirado de [33], onde no eixo vertical está indicado os níveis de energia em ordem crescente e no eixo horizontal o parâmetro  $\tau$ .

Outra característica comum de sistemas quânticos cujos análogos clássicos são caóticos é que seus autoestados geralmente apresentam um acúmulo de sua densidade de probabilidade ao longo das órbitas periódicas instáveis mais curtas do bilhar clássico associado. Esse fenômeno é conhecido como *scarring*, ou estado cicatrizado, e foi descoberto por Heller [43] ao estudar as autofunções do bilhar estádio de Bunimovich (veja figura 3). Ele enfatizou que um grande número de autofunções deste bilhar apresentam tal característica e que, dado um estado cicatrizado com número de onda  $k$  que está associado à uma órbita periódica instável de comprimento  $\mathcal{L}$ , é esperado ver uma família de estados cicatrizados da mesma órbita em  $k + 2\pi n/\mathcal{L}$  [43], com  $n$  inteiro. Além disso, no bilhar estádio de Bunimovich é fácil observar os chamados estados *bouncing ball* (BB) (estado inferior à direita da figura 3), que correspondem às sucessivas reflexões nas paredes retas do bilhar. A localização para os estados BB é maior que os demais estados cicatrizados e eles sobrevivem ao limite semiclássico [44, 45]. Além disso, os estados BB foram associados às estruturas tipo sóliton no espectro do bilhar estádio [34, 35].

Graças ao crescente avanço tecnológico, o interesse e o investimento na fabricação de estruturas meso e nanoscópicas, onde a função de onda do problema precisa se anular em suas paredes, tem-se intensificado. Os bilhares, além de fornecerem diversos resultados no âmbito do caos quântico, podem servir de modelos teóricos para tais estruturas. Alguns exemplos dessas aplicações são os pontos quânticos [46, 47, 48], cavidades de microondas [17, 49, 50], filmes finos [51], currais quânticos [52, 53, 54], interruptores quânticos [55, 56], etc. Juntamente com a importância experimental e tecnológica, cresceu

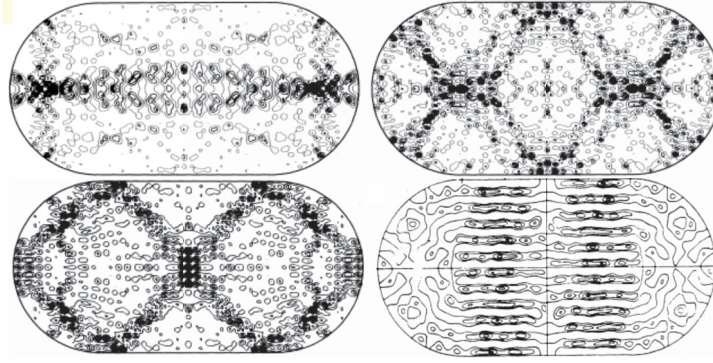


Figura 3 – Exemplos de estados cicatrizados do bilhar estádio de Bunimovich, retirado de [43].

também a necessidade de métodos simples e eficientes de resolução teórica dessa classe de sistemas. Alguns dos métodos mais utilizados são:

- *Boundary integral method*: É talvez o método mais utilizado na literatura para a obtenção das soluções para bilhares. A função de onda é expressa em termos de uma integral de linha e de sua derivada direcional [57];
- *Plane wave decomposition method*: este método utiliza uma superposição de ondas planas com fases aleatórias no intervalo  $[0, 2\pi)$  como *ansatz* para a função de onda [43];
- *Expansion method*: neste caso a função de onda é expressa como uma combinação linear das autofunções ortonormais do bilhar retangular [58].

Em meados de 1990 foi proposto um novo método, o método de contorno de paredes (MCP) [59], com uma abordagem diferente da maioria dos tratamentos teóricos, para a solução de problemas de espalhamento quântico de uma partícula por barreiras arbitrárias, abertas ou fechadas, conexas ou desconexas, com vários tipos de condições de contorno. O MCP já foi utilizado com sucesso no estudo de diversos sistemas, como por exemplo: condutância em ressonadores abertos [60], cristais fotônicos [61], otimização de cavidades para dispositivos coletores de fótons [62], ondas de matéria em fios quânticos e redes atômicas [63, 64] e tunelamento no bilhar elíptico aberto [65]. E também já foi testado em vários bilhares fechados, como por exemplo: quadrado, quarto de Sinai quadrado, quarto de Sinai e quarto de estádio de Bunimovich [66]. Mais recentemente foi utilizado no estudo das propriedades de transmissão de canais acoplados [67]. Uma das vantagens do MCP é que, diferentemente da maioria dos outros métodos de espalhamento, ele fornece, em um único cálculo, as soluções corretas para as regiões externa e interna da barreira. Além disso, o objeto matemático principal do método é uma função  $T$  que carrega informações acerca das autoenergias e da geometria da barreira. Tais características, aliadas a sua fácil implementação numérica, conferem simplicidade e eficácia ao MCP.

Diversos estudos estatísticos acerca do movimento paramétrico dos níveis de energia de sistemas quânticos classicamente caóticos, incluindo o bilhar de Sinai, já foram realizados,

tanto numéricos [26, 33, 41, 42], quanto experimentais [39]. No entanto, é de grande importância também estudar o comportamento das autofunções destes sistemas em função das suas geometrias, uma vez que a densidade de probabilidade  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  nos diz como a partícula se comporta em uma cavidade e que em realizações experimentais o desempenho do dispositivo depende de por onde as partículas podem transitar. Além disso, a análise das autofunções e das características do espectro de energias também nos auxiliam no estudo da transição entre os regimes regular e caótico. Esta relação e onde é o limite de ação de cada dinâmica ainda não é bem compreendida. Portanto, neste trabalho iremos aplicar o MCP e as propriedades da função  $T$  para estudarmos a dinâmica dos níveis de energia do bilhar de Sinai totalmente dessimetrizado, parametrizado pelo valor de seus ângulos internos e de seu raio, e a morfologia das funções de onda correspondentes para casos onde a dinâmica clássica é regular, mista e completamente caótica.

No segundo capítulo deste trabalho mostraremos o desenvolvimento analítico e numérico do MCP e discutiremos também algumas propriedades de  $T$ . Em seguida exemplificaremos tais propriedades e a utilização do MCP para a obtenção das soluções corretas de ressonância utilizando dois bilhares conhecidos na literatura: os bilhares quadrado e triângulo retângulo. Iremos ainda comentar sobre a aplicação do MCP no estudo da otimização de cavidades para dispositivos coletores de fótons. No terceiro capítulo faremos a discussão da dinâmica dos níveis de energia do bilhar de Sinai em função de dois parâmetros: os seus ângulos internos e o seu raio. Analisaremos o comportamento e a morfologia das autofunções nas vizinhanças das repelências e nas estruturas tipo sóliton presentes no espectro. Iremos também relacionar as órbitas periódicas instáveis do bilhar análogo clássico com os estados cicatrizados do bilhar quântico e mostraremos um modo de verificar se um dado estado cicatrizado está associado com uma determinada órbita. Como complemento ao estudo da dinâmica dos níveis de energia e da classificação do sistema quanto à sua dinâmica clássica, iremos mostrar as estatísticas da separação dos níveis de energias vizinhos para diferentes geometrias, isto é, diferentes valores de ângulos e raios.

## 2 O Método de Contorno de Paredes

### 2.1 Desenvolvimento analítico do MCP

Um problema quântico não-relativístico é resolvido somente se obtivermos uma função de onda que satisfaça tanto a equação de Schrödinger quanto as condições de contorno apropriadas. O análogo quântico de um bilhar clássico é definido pela equação de Schrödinger estacionária

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

onde  $m$  é a massa da partícula,  $E$  sua energia e  $\mathbf{r}$  seu vetor posição, em conjunto com condições de contorno do tipo Dirichlet. Além disso, devemos escolher um potencial  $V(\mathbf{r})$  no qual a partícula interaja somente nos pontos pertencentes à fronteira  $\mathcal{C}$  do bilhar, comportando-se como uma partícula livre dentro e fora da região  $\Omega$ , delimitada por  $\mathcal{C}$ .

Para realizarmos isso, iremos utilizar um potencial do tipo “parede- $\delta$ ” [59]

$$V(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{C}} \gamma(s)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(s))\{\alpha(s) + [1 - \alpha(s)]\partial_{\mathbf{n}}(s)\} ds, \quad (2.2)$$

onde a integração é feita sobre a fronteira  $\mathcal{C}$  que é parametrizada por  $s \in [0, L]$  e  $L$  é o perímetro do bilhar. O termo  $\gamma(s)$  define a permeabilidade da barreira e  $\alpha(s)$  controla o tipo de condição de contorno desejada sobre um ponto  $s$  da fronteira. A ação da função delta em (2.2) garante que a ação do potencial sobre a partícula seja somente sobre  $\mathcal{C}$ .

Os tipos de condições de contorno do problema serão definidos a partir da escolha correta dos parâmetros do potencial. Para valores de  $\gamma(s)$  finitos, (2.2) terá o efeito de uma parede permeável, no sentido de que existe uma probabilidade  $\mathcal{T} = 4k^2/(4k^2 + \gamma(s)^2)$  da partícula ser transmitida e uma probabilidade  $\mathcal{R} = \gamma(s)^2/(4k^2 + \gamma(s)^2)$  de ser refletida [59], onde  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ . No limite  $\gamma(s) \rightarrow \infty$  o efeito será de uma parede impenetrável, com a probabilidade de transmissão tendendo a zero e a função de onda da partícula se anulando em  $s$  (condição de Dirichlet).

Reescrevendo (2.1) como

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

onde  $U(\mathbf{r}) = 2mV(\mathbf{r})/\hbar^2$  e admitindo a existência de uma função  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; k)$ , tal que

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; k) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

qualquer função  $\psi(\mathbf{r})$  que satisfaça a

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; k)U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.4)$$



com  $(\nabla^2 + k^2)\varphi(\mathbf{r}) = 0$  e  $G_0$  sendo a função de Green livre, também satisfaz a (2.3). Em duas dimensões, a função de Green livre é dada por

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; k) = -\frac{2mi}{4\hbar^2} H_0^{(+)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (2.5)$$

onde  $i = \sqrt{-1}$  e  $H_0^{(+)}$  é a função de Henkel de ordem zero do primeiro tipo, que corresponde a soluções esféricas da equação de Schrödinger livre em duas dimensões [68]. A equação (2.4) é conhecida na literatura por equação de Lipmann-Schwinger e é uma das equações mais utilizadas para descrever espalhamento na mecânica quântica. Para simular a ação de uma parede sobre a partícula utilizaremos o potencial (2.2) com  $\alpha(s) = 1 \forall s$ , o que garante a condição de contorno de Dirichlet sobre toda a fronteira do bilhar, isto é,

$$V(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{C}} \gamma(s) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(s)) ds. \quad (2.6)$$

Claramente  $V(\mathbf{r}) = 0$  se  $\mathbf{r} \notin \mathcal{C}$ , de modo que a ação de um potencial tipo parede é verificada.

Com  $2m = \hbar = 1$  e substituindo o potencial (2.6) em (2.4), temos

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \int G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; k) \left[ \int_{\mathcal{C}} \gamma(s) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}(s)) ds \right] \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'.$$

A integração sobre  $\mathbf{r}'$  torna-se trivial observando-se a propriedade de filtro da função delta. Segue que

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \int_{\mathcal{C}} \gamma(s) G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s); k) \psi(\mathbf{r}(s)) ds^*. \quad (2.7)$$

Esta equação pode ser interpretada como a equação integral de espalhamento para uma barreira permeável  $\mathcal{C}$  caracterizada por  $\gamma(s)$ .

De agora em diante iremos considerar  $\gamma(s)$  constante sobre toda a barreira. O caso em que a permeabilidade é variável ao longo da barreira pode ser tratado de forma semelhante ao caso constante trazendo, no entanto, complicações adicionais que não contribuem para o entendimento do método. Desta forma, por simplicidade iremos considerar  $\gamma(s) = \gamma \forall s$ . Tomando um ponto de espalhamento sobre a barreira com  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(s_b)$  em (2.7) e isolando  $\varphi(\mathbf{r}(s_b))$ , temos que

$$\varphi(\mathbf{r}(s_b)) = \psi(\mathbf{r}(s_b)) - \int_{\mathcal{C}} \gamma G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s_a); k) \psi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a, \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} &= \int_{\mathcal{C}} \delta(s_b - s_a) \psi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a - \int_{\mathcal{C}} \gamma G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s_a); k) \psi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a, \\ &= \int_{\mathcal{C}} [\delta(s_b - s_a) - \gamma G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s_a); k)] \psi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a, \\ &= \int_{\mathcal{C}} T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a) \psi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a, \end{aligned} \quad (2.9)$$

---

\*A interpretação física de  $\varphi(\mathbf{r})$  será discutida mais adiante

onde definimos  $T_\gamma^{-1}(s_b, s_a) = \delta(s_b - s_a) - \gamma G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s_a); k)^\dagger$ . Pela definição de  $T_\gamma^{-1}$  fica claro que ela é simétrica com relação à troca  $s_b \leftrightarrow s_a$ , uma vez que a função delta e a função de Green também são simétricas com relação à essa mesma troca.

Determinamos a função  $T_\gamma(s_b, s_a)$  através da exigência que ela deva possuir uma inversa, uma vez que ela está relacionada à operadores Hermitianos que possuem inversa, isto é

$$\delta(s_a - s_b) = \int_{\mathcal{C}} T_\gamma(s_b, s_c) T_\gamma^{-1}(s_c, s_a) ds_c. \quad (2.10)$$

Como  $T_\gamma^{-1}$  é simétrica,  $T_\gamma$  também é, logo, podemos também obtê-la através de

$$\delta(s_a - s_b) = \int_{\mathcal{C}} T_\gamma^{-1}(s_b, s_c) T_\gamma(s_c, s_a) ds_c. \quad (2.11)$$

Podemos então expressar  $\psi(\mathbf{r})$  em termos de  $T_\gamma$  ao invés de  $T_\gamma^{-1}$ . Para isto, vamos aplicar  $T_\gamma(s_c, s_b)$  em (2.9)

$$T_\gamma(s_c, s_b) \varphi(\mathbf{r}(s_b)) = \int_{\mathcal{C}} T_\gamma(s_c, s_b) T_\gamma^{-1}(s_b, s_a) \psi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a.$$

Integrando ao longo da fronteira sobre  $ds_b$  os dois lados da equação acima, obtemos, após utilizar (2.10) e as propriedades da função delta,

$$\psi(\mathbf{r}(s_c)) = \int_{\mathcal{C}} T_\gamma(s_c, s_b) \varphi(\mathbf{r}(s_b)) ds_b. \quad (2.12)$$

Substituindo (2.12) no integrando de (2.8), obtemos finalmente

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b); k) \gamma T_\gamma(s_b, s_a) \varphi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a ds_b. \quad (2.13)$$

A resolução de (2.13) fornece a função de onda de uma partícula, de número de onda  $k$ , interagindo com uma barreira  $\mathcal{C}$  de permeabilidade  $\gamma$  para todos os pontos do espaço. Diferentemente dos outros métodos citados anteriormente, através do MCP, para regiões fechadas (bilhares), é possível obter em um único cálculo a solução do problema de espalhamento (solução externa) e as soluções internas (autoestados), sem a necessidade de distinguir as duas regiões. Além disso, a função de onda  $\psi(\mathbf{r})$  depende apenas de parâmetros conhecidos:  $G_0$ ,  $\gamma$  e  $\varphi$  e as integrais são realizadas apenas sobre a fronteira  $\mathcal{C}$ .

Para completarmos a nossa solução precisamos encontrar uma forma de obter  $T_\gamma$ . Para isso, vamos substituir a definição de  $T_\gamma^{-1}$  em (2.10)

$$\begin{aligned} \delta(s_a - s_b) &= \int_{\mathcal{C}} T_\gamma(s_b, s_c) [\delta(s_c - s_a) - \gamma G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a); k)] ds_c, \\ &= \int_{\mathcal{C}} T_\gamma(s_b, s_c) \delta(s_c - s_a) ds_c - \int_{\mathcal{C}} T_\gamma(s_b, s_c) \gamma G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a); k) ds_c, \\ &= T_\gamma(s_b, s_a) - \int_{\mathcal{C}} T_\gamma(s_b, s_c) \gamma G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a); k) ds_c. \end{aligned} \quad (2.14)$$

---

<sup>†</sup> A função  $T_\gamma(s_b, s_a)$  está associada à probabilidade da partícula incidir sobre o ponto  $s_b$  e ser espalhada no ponto  $s_a$ . A interpretação física de  $T_\gamma$  e suas características serão discutidas na seção 2.2.

Isolando  $T_\gamma(s_b, s_a)$ , obtemos

$$T_\gamma(s_b, s_a) = \delta(s_a - s_b) + \int_{\mathcal{C}} T_\gamma(s_b, s_c) \gamma G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a); k) ds_c. \quad (2.15)$$

Para resolvermos essa equação integral vamos utilizar o método recursivo de séries de Neumann [68], resultando em

$$T_\gamma(s_b, s_a) = \delta(s_a - s_b) + \sum_{i=1}^{\infty} T_\gamma^{(i)}(s_b, s_a), \quad (2.16)$$

onde

$$\begin{aligned} T_\gamma^{(i)} &= \gamma^i \int_{\mathcal{C}} G_0(\mathbf{r}(s_a), \mathbf{r}(s_1); k) G_0(\mathbf{r}(s_a), \mathbf{r}(s_1); k) \times \cdots \\ &\times G_0(\mathbf{r}(s_{i-1}), \mathbf{r}(s_b); k) ds_1 ds_2 \cdots ds_{i-1}. \end{aligned}$$

Até esse ponto a nossa discussão foi apenas para o caso em que a permeabilidade  $\gamma$  é finita e constante. No entanto, o nosso interesse está em estudar bilhares com paredes rígidas, isto é, precisamos encontrar os análogos das equações (2.13) e (2.16) no limite  $\gamma \rightarrow \infty$ . Para tanto, partimos da equação (2.14), que é a identidade (2.10) em conjunto com a definição de  $T_\gamma^{-1}$ . Podemos reescrevê-la como

$$\delta(s_b - s_a) = -\frac{1}{\gamma} [-\gamma T_\gamma(s_b, s_a)] + \int_{\mathcal{C}} [-\gamma T_\gamma(s_b, s_c)] G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a); k) ds_c.$$

Tomando o limite  $\gamma \rightarrow \infty$  na equação acima

$$\delta(s_b - s_a) = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \left\{ -\frac{1}{\gamma} [-\gamma T_\gamma(s_b, s_a)] \right\} + \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{C}} [-\gamma T_\gamma(s_b, s_c)] G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a); k) ds_c.$$

Agora, multiplicando (2.12) por  $\gamma$ , temos

$$\gamma \psi(\mathbf{r}(s_c)) = \int_{\mathcal{C}} \gamma T_\gamma(s_c, s_b) \varphi(\mathbf{r}(s_b)) ds_b.$$

Como no limite  $\gamma \rightarrow \infty$  a expressão acima não pode divergir para que (2.7) tenha solução, então, exceto para o caso em que  $s_b = s_c$ , a quantidade  $\gamma T_\gamma(s_c, s_b)$  deve ser finita em tal limite. Portanto, definindo

$$T(s_c, s_b) = -\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \gamma T_\gamma(s_c, s_b), \quad (2.17)$$

teremos

$$\delta(s_b - s_a) = \int_{\mathcal{C}} T(s_b, s_c) G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a); k) ds_c. \quad (2.18)$$

O cálculo partindo da identidade (2.11) é semelhante e o resultado é dado por

$$\delta(s_b - s_a) = \int_{\mathcal{C}} G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s_c); k) T(s_c, s_a) ds_c. \quad (2.19)$$

Nos resta agora encontrar a expressão final de  $\psi(\mathbf{r})$  no limite  $\gamma \rightarrow \infty$ . Tomando o limite  $\gamma \rightarrow \infty$  em (2.13), obtemos

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &= \varphi(\mathbf{r}) + \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b); k) \gamma T_\gamma(s_b, s_a) \varphi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a ds_b, \\ &= \varphi(\mathbf{r}) + \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b); k) \lim_{\gamma \rightarrow \infty} [\gamma T_\gamma(s_b, s_a)] \varphi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a ds_b,\end{aligned}$$

uma vez que  $\varphi$  e  $G_0$  não dependem de  $\gamma$ . Utilizando então a definição de  $T$ , (2.17), obtemos

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) - \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b); k) T(s_b, s_a) \varphi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a ds_b. \quad (2.20)$$

A equação (2.20) fornece a função de onda em todo o espaço para uma partícula interagindo com uma barreira  $\mathcal{C}$  impenetrável. Neste caso, e no caso permeável (equação (2.13)), interpretamos  $\varphi(\mathbf{r})$ , que é a solução homogeneia da equação de Helmholtz (2.3), como uma onda incidente no problema de espalhamento (externo). É fácil verificar que (2.20) satisfaz à condição de contorno de Dirichlet sobre  $\mathcal{C}$ . De fato, fazendo  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(s)$  e usando (2.19), obtemos

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}(s)) &= \varphi(\mathbf{r}(s)) - \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} G_0(\mathbf{r}(s), \mathbf{r}(s_b); k) T(s_b, s_a) \varphi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a ds_b, \\ &= \varphi(\mathbf{r}(s)) - \int_{\mathcal{C}} \delta(s - s_a) \varphi(\mathbf{r}(s_a)) ds_a, \\ &= 0.\end{aligned}$$

## 2.2 Propriedades da matriz $T$

Dos resultados mostrados anteriormente, notamos que o MCP gira em torno da introdução da matriz  $T$ , pois uma vez que conhecida sua forma matemática, as equações (2.13) e (2.20) podem ser resolvidas.

No entanto, a matriz  $T$  não é apenas um objeto matemático para a obtenção da função de onda  $\psi(\mathbf{r})$ . Ela é uma função da energia e carrega informações essenciais acerca das autoenergias, da geometria e das simetrias do sistema. Devido a isso, ela possui um mecanismo de filtro, agindo no sentido de extrair qualquer parte da onda incidente que se anule na fronteira  $\mathcal{C}$ , obtendo assim os estados ressonantes e autoestados do sistema (ver seção 2.4). Além disso, diferentes propriedades dos autoestados correspondentes podem ser indentificadas diretamente de  $T$  [59, 66]. De fato, os elementos  $T(s_b, s_a)$  apresentam as seguintes propriedades [40], que explicitam as relações descritas acima:

- (a)  $|T(s_b, s_a)|$  está relacionado com a probabilidade da partícula incidir em um elemento  $s_a$  e ser espalhada em  $s_b$  da barreira;
- (b) Se a energia  $E = k^2$  da onda incidente  $\varphi(\mathbf{r})$  não corresponder a um estado ressonante do sistema (um autoestado no caso fechado ou um estado ligado ao contínuo [69, 70, 71] no caso aberto),  $|T(s_b, s_a)|$  é apreciável apenas para  $s_b \approx s_a$ ;

- (c) Para valores de energia ressonantes,  $|T(s_b, s_a)|$  possui uma rica estrutura, com os elementos  $s_b \approx s_a$  apresentando um aumento acentuado quando comparados com (b) e com os termos onde  $s_b \neq s_a$  sendo expressivamente diferente de zero;
- (d) Suponha duas regiões distintas de  $\Omega$  ( $\Omega_A$  e  $\Omega_B$ , por exemplo), delimitadas pelos segmentos  $\mathcal{C}_A$  e  $\mathcal{C}_B$ . Então, na ressonância, o elemento  $|T(s_b \in \mathcal{C}_B, s_a \in \mathcal{C}_A)|$  é apreciável somente se o estado interno associado à energia  $E = k^2$  da onda incidente estende-se até as regiões  $\Omega_A$  e  $\Omega_B$  [40]. Em outras palavras, se o estado for localizado em  $\Omega_A$ , por exemplo, apenas os elementos  $|T(s_b \in \mathcal{C}_A, s_a \in \mathcal{C}_A)|$  serão relevantes (além dos elementos na vizinhança de  $s_b = s_a$ ).

Nas equações (2.13) e (2.20), a função de onda  $\psi(\mathbf{r})$ , após ser espalhada, é formada pela soma de uma onda incidente  $\varphi(\mathbf{r})$  com uma parte espalhada  $\psi^{\text{esp}}(\mathbf{r})$ , que interagiu com a barreira. Para qualquer ponto  $\mathbf{r}$  no espaço, tanto fora quanto dentro de  $\mathcal{C}$ , a parte espalhada da função de onda é resultado da soma dos valores da onda espalhada por cada ponto da barreira. Podemos, então, interpretar a construção de  $\psi(\mathbf{r})$  através de um princípio semelhante ao de Huygens. A matriz  $T$  nesse processo atua como um propagador da onda sobre a barreira. Para um dado  $s_a$ ,  $T$  propaga a “onda fonte” até um ponto  $s_b$  que então é propagado livremente até  $\mathbf{r}$  pela função de Green  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_b; k)$ , como está esquematizado na figura 4. Todas as interações que acontecem entre o ponto de “incidência”  $s_a$  e o ponto de “saída”  $s_b$  da barreira estão incluídos em  $T$ . Ou seja, ela não é uma quantidade perturbativa (veja a equação 2.16),  $T$  já representa todas as contribuições dos múltiplos espalhamentos ocorridos nas paredes do bilhar. Assim,  $\psi^{\text{esp}}(\mathbf{r})$  é resultado da soma de todas as contribuições deste tipo, como podemos observar na equação (2.20).

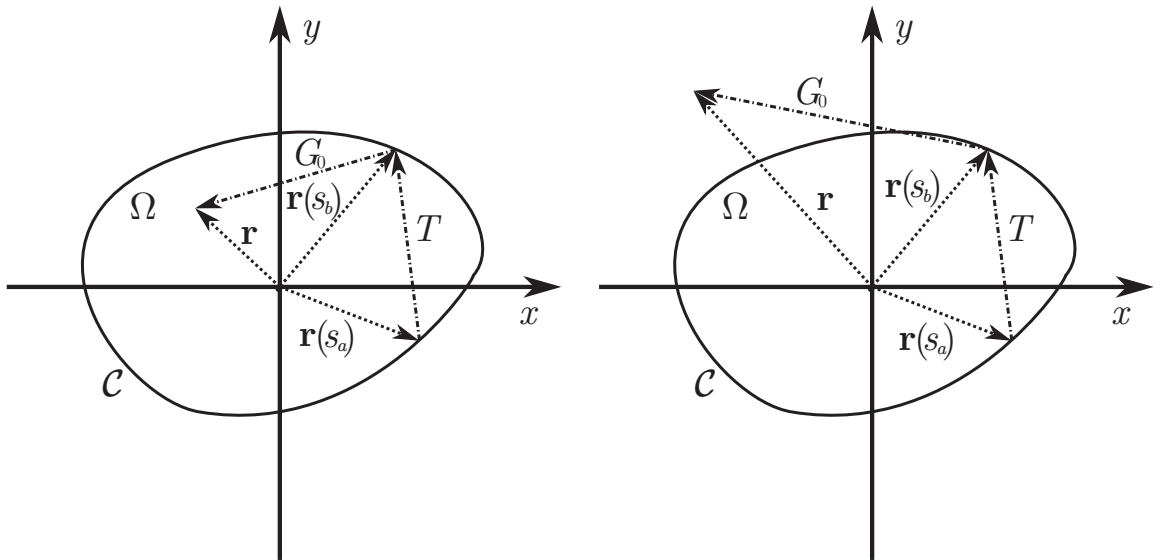


Figura 4 – Representação esquemática de um dos passos do processo de espalhamento na regiões interna (esquerda) e externa (direita). A soma de todas as contribuições deste tipo levam a onda espalhada ao ponto  $\mathbf{r}$ .

Nesse processo, o módulo de  $T(s_b, s_a)$  é interpretado como a amplitude de probabilidade do componente que incide perpendicularmente à barreira em  $s_a$  ser espalhado e “sair” em  $s_b$ . A partir desta observação podemos entender por que o módulo dos elementos da diagonal de  $T$  são sempre maiores que os elementos fora da diagonal. Nesta situação estamos analisando a probabilidade de uma partícula incidir sobre um ponto da barreira espalhadora e sair por esse mesmo ponto. Tal probabilidade é, logicamente, maior que a probabilidade da partícula sair por outro ponto da barreira.

Da discussão acima podemos também entender o mecanismo que gera os autoestados internos quando  $k$  for um  $k$  ressonante, ou que fornece  $\psi(\mathbf{r}) = 0$ , para  $\mathbf{r} \in \Omega$  quando  $k$  não pertence ao espectro de energias do bilhar. Primeiramente podemos pensar em  $T(s_b, s_a)$  como sendo fontes pontuais de onda. Fora da ressonância, os elementos  $T(s_b, s_a)$  não estão correlacionados de forma que as fontes não são coerentes e a soma dessas contribuições resultam em uma interferência destrutiva. Por outro lado, quando estivermos em uma ressonância, os elementos  $T(s_b, s_a)$  possuem um padrão característico da ressonância e isso dá origem a uma interferência construtiva. As propriedades discutidas nesta seção serão exemplificadas na seção 2.4.

Outro aspecto importante da matriz  $T$  é a sua singularidade na “diagonal principal”,  $s_b = s_a$ . Este fato é uma consequência direta da definição de  $T$ , dada por (2.19)

$$\delta(s_b - s_a) = \int_{\mathcal{C}} G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s); k) T(s, s_a) ds. \quad (2.19)$$

Primeiro, notamos que a integral diverge apenas para  $s_b = s_a$ . Também, essa é a única situação em que todos os argumentos de  $G_0$  e  $T$  podem simultaneamente coincidir conforme a variável de integração  $s$  percorre  $\mathcal{C}$ . Segundo,  $G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s); k)$  diverge logicamente para  $|\mathbf{r}(s_b) - \mathbf{r}| \rightarrow 0$  (veja equação (2.5)), ou seja,  $G_0$  sozinha é integrável, isto é, sua integral ao longo de  $\mathcal{C}$  é finita. A partir destas observações podemos concluir que  $T$  deve possuir uma singularidade. Além disso, esta singularidade está localizada em  $s_b = s_a$ , uma vez que é a combinação das singularidades de  $T$  e  $G_0$  que fazem com que a integral divirja.

Guiados pelas propriedades da matriz  $T$  discutidas acima, podemos identificar e classificar os estados de um dado sistema diretamente a partir das características observadas de  $T$ . Essa análise pode ser feita da seguinte forma: para uma estrutura arbitrária, definimos um parâmetro geométrico,  $g$ , que pode ser o raio do disco interno no bilhar de Sinai, ou um ângulo interno de um triângulo, por exemplo. Então, calculamos a média do valor absoluto dos elementos da matriz  $T$ , com exceção dos elementos da diagonal, isto é,  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle_{s_b \neq s_a}$ , e os plotamos como função de  $k = \sqrt{E}$  e do parâmetro geométrico [40]. O motivo de plotarmos a média de  $|T(s_b, s_a)|$  ao invés de um único elemento é que como  $T(s_b, s_a)$  está relacionado com a probabilidade da partícula incidir em  $s_a$  e ser espalhada em  $s_b$ , ao plotarmos somente este elemento, estaremos levando em conta apenas esta contribuição da matriz  $T$  na construção do autoestado. Ao plotarmos a média, levamos em conta todos os possíveis espalhamentos. Picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle_{s_b \neq s_a}$





escrever, em boa aproximação

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \varphi(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^N \gamma \psi(\mathbf{r}_j) \int_{\mathcal{C}_j} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s); k) ds. \quad (2.21)$$

Fazendo agora  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i$ , com  $s_i$  sendo um ponto de  $\mathcal{C}_i$ , obtemos de (2.21)

$$\psi(\mathbf{r}_i) \approx \varphi(\mathbf{r}_i) + \sum_{j=1}^N \mathbb{M}_{ij} \gamma \psi(\mathbf{r}_j), \quad (2.22)$$

onde

$$\mathbb{M}_{ij} = \int_{\mathcal{C}_j} G_0(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}(s); k) ds. \quad (2.23)$$

Para  $\Psi = (\psi(\mathbf{r}_1), \psi(\mathbf{r}_2), \dots, \psi(\mathbf{r}_N))^T$  e  $\Phi = (\varphi(\mathbf{r}_1), \varphi(\mathbf{r}_2), \dots, \varphi(\mathbf{r}_N))^T$ , (2.22) nos leva a

$$\Psi = \Phi + \gamma \mathbb{M} \Psi,$$

que pode ser reescrita como

$$\gamma \Psi = \mathbb{T} \Phi \quad (2.24)$$

com

$$\mathbb{T} = \gamma [\mathbb{I} - \gamma \mathbb{M}]^{-1}.$$

Aqui,  $\mathbb{T}$  é a versão discreta da função  $T(s_b, s_a)$  que definimos em (2.19). Ela é uma matriz  $N \times N$  complexa e simétrica. Tomando o  $i$ -ésimo elemento da matriz coluna  $\Psi$  em (2.24)

$$\gamma \Psi_i = \gamma \psi(\mathbf{r}_i) = (\mathbb{T} \Phi)_i.$$

Então, substituindo em (2.22), obtemos

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \varphi(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^N \int_{\mathcal{C}_j} G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) ds (\mathbb{T} \Phi)_j$$

Podemos aproximar a integral acima pelo seu valor no ponto médio de  $\mathcal{C}_j$  com  $\Delta_j$  sendo seu comprimento, obtendo assim a forma discretizada da equação (2.13)

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \varphi(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^N G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \Delta_j (\mathbb{T} \Phi)_j. \quad (2.25)$$

Esta é a forma discreta da função de onda em todo o espaço de uma partícula interagindo com uma barreira  $\mathcal{C}$  de permeabilidade  $\gamma$  finita. Para obtermos a matriz  $\mathbb{M}$  utilizamos novamente o teorema do valor médio, agora em (2.23), como fizemos para  $\psi$ . Deste modo, temos que a forma discretizada de (2.23) é

$$\mathbb{M}_{ij} \approx G_0(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; k) \Delta_j. \quad (2.26)$$

Como a função de Green livre em duas dimensões é dada por (2.5) e como a função de Henkel diverge para  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| \rightarrow 0$ , quando  $i = j$  nós teremos problemas com a aproximação

acima. Portanto, para os elementos da diagonal de  $\mathbb{M}$  teremos que calcular explicitamente a integral em (2.23).

Para o caso de uma barreira impermeável, onde  $\gamma \rightarrow \infty$ , descrito por (2.20), temos que  $\mathbb{T} \rightarrow -\mathbb{M}^{-1}$  e então (2.25) fica

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \varphi(\mathbf{r}) - \sum_{j=1}^N G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \Delta_j (\mathbb{M}^{-1} \Phi)_j. \quad (2.27)$$

Analogamente à (2.25), (2.27) é a forma discreta da função de onda de uma partícula interagindo com uma barreira  $\mathcal{C}$  impermeável.

No limite  $N \rightarrow \infty$ , em princípio, as soluções (2.25) e (2.27) tendem para as soluções exatas (2.13) e (2.20). No entanto, o tempo do cálculo numérico escala com  $\mathcal{O}(N^2)$ , então precisamos escolher um  $N$  para o qual o tempo computacional seja razoável e que seja grande o suficiente para satisfazer o limite para a validação dos resultados. Um modo de calcularmos o número de divisões da barreira que otimiza tanto o resultado numérico, quanto a performance computacional, é observando que o método traz bons resultados para [66]

$$\frac{\Delta_j}{\lambda} < 10^{-1},$$

onde  $\Delta_j = L/N$  é o comprimento do segmento  $\mathcal{C}_j$ ,  $L$  o perímetro de  $\mathcal{C}$  e  $\lambda = 2\pi/k$  é o comprimento de onda da onda incidente. Ou seja,  $\lambda$  deve ser maior que os elementos  $\Delta_j$  da discretização de  $\mathcal{C}$  para a onda considerar a barreira como uma parede e não haver um “vazamento” da função de onda através da fronteira.

Na prática, no entanto, não dividimos a fronteira  $\mathcal{C}$  de um bilhar em  $N$  partes iguais, e sim levamos em conta o comprimento de cada lado  $\ell_i^\dagger$  para definirmos o número de pontos sobre cada um deles. Primeiramente nós definimos um valor constante para a razão  $\Delta_i/\lambda = \mathcal{R}$ , onde  $\Delta_i = \ell_i/n_i$  é o tamanho da separação dos  $n_i$  pontos sobre o lado  $\ell_i$ . Desta forma, o número de pontos  $n_i$  sobre o  $i$ -ésimo lado é

$$n_i = \frac{\ell_i k}{2\pi \mathcal{R}}$$

de modo que o número total de pontos sobre a contorno  $\mathcal{C}$  do bilhar é

$$N = \sum_i n_i.$$

A vantagem de manter a razão  $\mathcal{R}$  constante ao invés do número de pontos  $N$  é que é utilizada a mesma precisão para todas as regiões do espectro.

## 2.4 Aplicações do MCP

Nesta seção iremos exemplificar a aplicação do MCP para dois bilhares quânticos conhecidos na literatura: o bilhar quadrado e o bilhar triângulo retângulo (veja a figura 6), focando nas propriedades da matriz  $T$ , dada por  $\mathbb{M}^{-1}$ , e na função de onda  $\psi(\mathbf{r})$ , dada por (2.27). O primeiro bilhar que apresentaremos possui uma dinâmica clássica regular e o segundo é um exemplo de bilhar poligonal que pode apresentar uma dinâmica mista. Além disso, iremos comentar acerca da utilização do MCP na otimização de cavidades para dispositivos coletores de fótons.

Acerca dos detalhes numéricos das simulações, para o cálculo da função onda (2.27), a menos que seja dito o contrário, utilizaremos como onda incidente ondas planas do tipo  $\varphi(\mathbf{r}) = \exp[i(k_x x + k_y y)]$ , onde  $k$  é o módulo do vetor de onda de  $\varphi$ , dado por  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$  e  $k_x = k \cos \theta$ ,  $k_y = k \sin \theta$ , com  $\theta = \arctan(k_y/k_x)$  sendo o ângulo de incidência de  $\varphi$  sobre bilhar, medido a partir do eixo  $x$  positivo. Com relação ao número de pontos sobre a barreira, utilizaremos o valor da razão  $\mathcal{R} = 0,05$  para os segmentos retos e  $\mathcal{R} = 0,025$  para os segmentos curvos<sup>§</sup>. Além disso, a menos que seja dito o contrário, em todos os gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e  $|T|^2$  as regiões escuras correspondem aos máximos e as regiões claras aos mínimos.

### 2.4.1 Bilhar quadrado

Vamos começar a discussão dos exemplos numéricos calculados através do MCP com o caso do bilhar quadrado de lado unitário. Guiados pela discussão feita na seção 2.2, primeiramente obtemos o espectro de energias para o bilhar através do gráfico de  $\langle T(s_b, s_a) \rangle_{s_b \neq s_a} \times k$ , com o parâmetro geométrico  $g$  que define a geometria do sistema constante, onde cada pico da matriz  $T$  representa um autoestado do sistema. Na figura 7 encontra-se tal gráfico para um intervalo  $k \in [2, 25]$  e  $k \in [64, 4, 64, 8]$ . Após a obtenção do



Figura 6 – (a) bilhar quadrado e (b) bilhar triângulo retângulo.

<sup>‡</sup>Caso o bilhar possua alguma parte curva, como o bilhar de Sinai, o “lado”  $\ell_i$  será o comprimento de arco referente à essa parte curva.

<sup>§</sup>A razão  $\mathcal{R}$  deve ser menor para a parte curva pois é necessário um maior número pontos para que a partícula veja o segmento como uma curva.

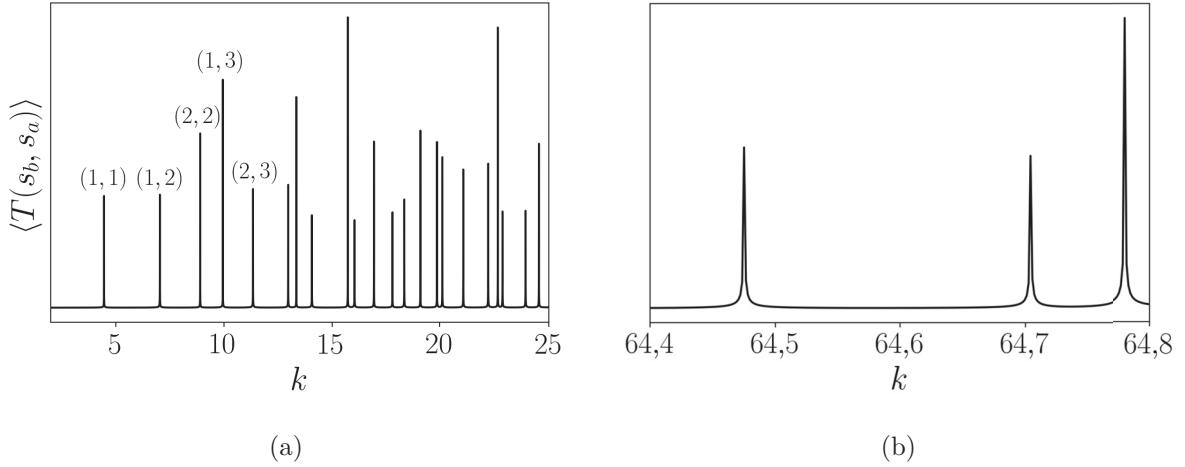


Figura 7 – Gráfico da média dos elementos da matriz  $T$ , com excessão dos elementos da diagonal em função do número de onda  $k$ . Os picos de  $T$  representam autoestados do sistema interno e altura dos picos não possui relevância física, uma vez que no limite  $N \rightarrow \infty$  a altura tende a infinito, o que está associado à divergência da função de Green. (a) Primeiras ressonâncias do bilhar quadrado, com os cinco primeiros autoestados  $(n_x, n_y)$  indicados. (b): picos da matriz  $T$  referentes aos estados exibidos nas figuras 9, 10 e 11.

valor de  $k$  de ressonância a partir da análise dos picos de  $T$ , surge o problema de saber o ângulo correto de incidência de  $\varphi$  correspondente ao valor de  $k$ . Uma vez que a matriz  $T$  não carrega informações acerca da direção do vetor de onda  $\mathbf{k}$ , somente de seu módulo  $|\mathbf{k}| = k$  (veja a definição de  $T$ , dada por (2.19)), não temos indícios através dela de como separar  $k$  em suas componentes  $k_x$  e  $k_y$ . No entanto, sabemos que a solução da equação de Schrödinger (2.1) para uma partícula confinada em uma região quadrada de lado unitário é dada por [72]

$$\psi_{n_x, n_y}(\mathbf{r}) = 2 \sin k_x x \sin k_y y, \quad (2.28)$$

com  $k_x = \pi n_x$ ,  $k_y = \pi n_y$ ,  $k = \pi \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$  e  $\theta = \arctan k_y / k_x = \arctan n_y / n_x$ . Portanto, neste caso, ao definirmos  $(n_x, n_y)$ , definimos automaticamente  $k$  e  $\theta$ . Note ainda que a troca  $n_x \leftrightarrow n_y$  gera uma função de onda diferente com mesma energia. Ou seja, para  $n_x \neq n_y$  toda energia tem, pelo menos, uma degenerescência de grau dois. Essa degenerescência é devida à simetria do bilhar. Existem ainda casos em que ocorrem degenerescências acidentais devido à forma matemática de  $k$ . Por exemplo,  $k_{1,7} = k_{7,1} = k_{5,5} = 21,21$ . Somente através da análise do gráfico  $\langle T(s_b, s_a) \rangle_{s_b \neq s_a} \times k$  não é possível dizer se um estado é ou não degenerado. Para o caso do quadrado, para o qual é conhecida expressão analítica para o espectro de energias, é fácil identificá-los. Porém, para a maioria dos bilhares tal expressão não existe. Logo, somente através da análise da função de onda  $\psi(\mathbf{r})$  em função do ângulo de incidência  $\theta$  é possível distingui-los.

Como discutimos na seção 2.2, certas características da matriz  $T$  se sobressaem quando esta é analisada em um caso em que a onda incidente possui energia igual à uma

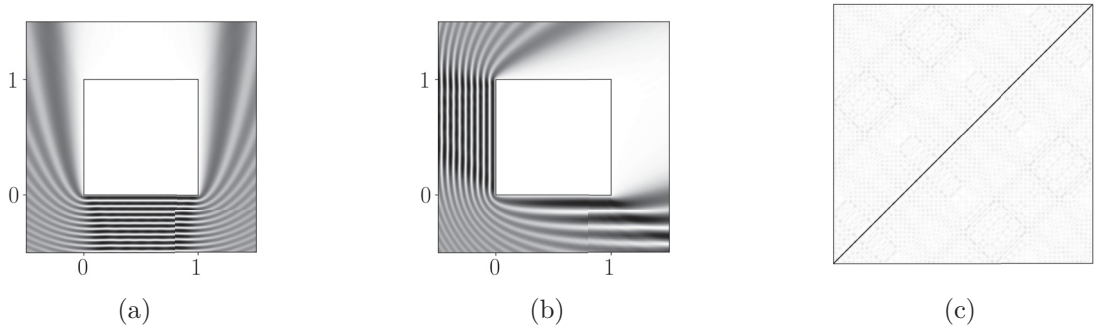


Figura 8 – (a) e (b): gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para (a)  $k = 64,55$  e  $\theta = 90^\circ$  e (b):  $k = 64,4749$  ( $n_x = 14$ ,  $n_y = 15$ ) e  $\theta = 20^\circ$ . (c): gráfico de densidade de  $|T|^2$  para  $k = 64,55$ .

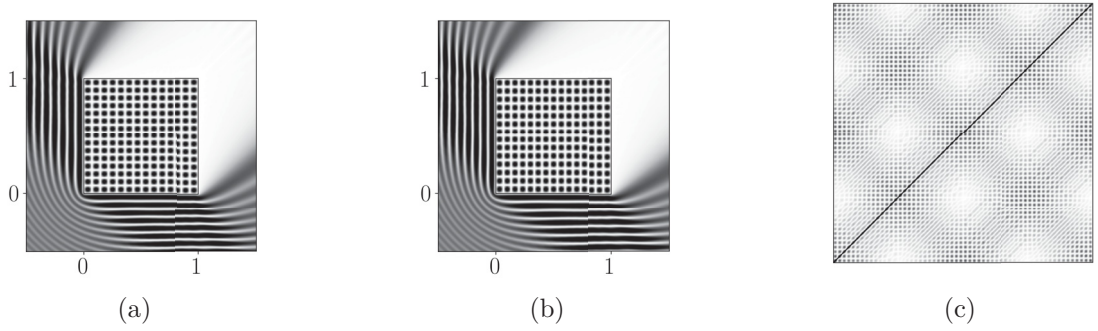


Figura 9 – (a) e (b): gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $k = 64,4749$  ( $n_x = 14$ ,  $n_y = 15$ ) com (a)  $\theta = 43,02^\circ$  e (b):  $\theta = 46,97^\circ$ . (c): gráfico de densidade de  $|T|^2$ .

autoenergia do bilhar, em comparação ao caso em que a energia não pertence ao espectro de energias do bilhar. Para o caso fora da ressonância, exemplificado nas figuras 8(a) e 8(c), vemos que os elementos na vizinhança da diagonal da matriz  $T$  são muito mais elevados que os elementos distantes da diagonal e que  $\psi(\mathbf{r}) = 0$  na região interna do bilhar. Observamos ainda que não basta conhecermos apenas o valor correto da autoenergia, como discutido acima, é necessário também ter o conhecimento do ângulo de incidência da onda na parte externa ao bilhar de modo a decompor corretamente as componentes  $k_x$  e  $k_y$  para satisfazer as condições de simetria do problema, como mostra a figura 8(b), que possui a autoenergia correta, porém o ângulo de incidência está incorreto.

Já para um valor de  $k$  ressonante, exemplificado nas figuras 9, 10 e 11, além da vizinhança da diagonal, os outros elementos de  $T$  possuem valores apreciáveis de modo que essa matriz apresenta uma rica estrutura e diferentes padrões. Para o cálculo da matriz  $T$  e da função de onda  $\psi(\mathbf{r})$  exibidas nas figuras citadas utilizamos o valor obtido através do MCP para o número de onda e o valor teórico para o ângulo de incidência. Os desvios dos valores exatos de  $k$  para os obtidos através do MCP foram de aproximadamente 0,02%.

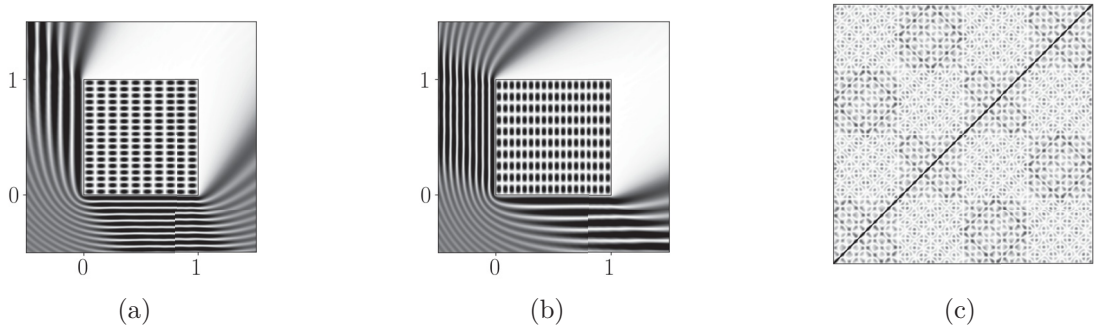


Figura 10 – (a) e (b): gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $k = 64,7041$  ( $n_x = 10$ ,  $n_y = 18$ ) com (a)  $\theta = 29,05^\circ$  e (b):  $\theta = 60,95^\circ$ . (c): gráfico de densidade de  $|T|^2$ .

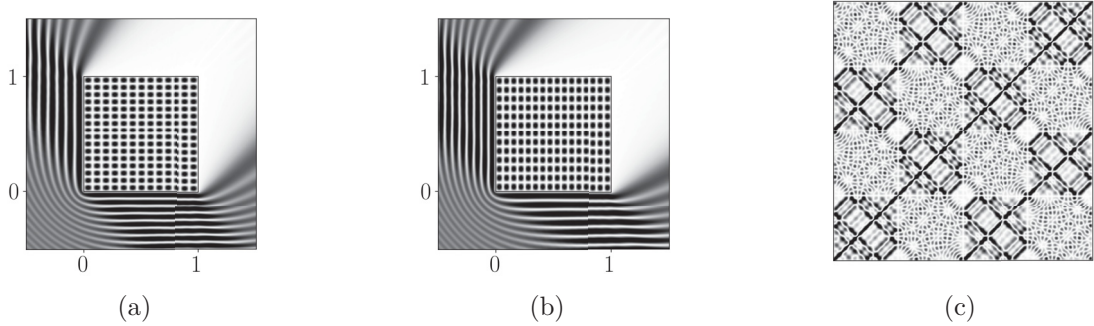


Figura 11 – (a) e (b): gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $k = 64,7805$  ( $n_x = 13$ ,  $n_y = 16$ ) com (a)  $\theta = 30,09^\circ$  e (b):  $\theta = 50,91^\circ$ . (c): gráfico de densidade de  $|T|^2$ .

### 2.4.2 Bilhar triângulo retângulo

Vamos agora discutir o caso do bilhar triângulo retângulo cujos catetos medem 1. Novamente, a primeira coisa a ser feita é obter o espectro de energias utilizando a matriz  $T$ . Na figura 12 se encontra tal gráfico para um intervalo  $k \in [2, 25]$  e  $k \in [64,4, 64,8]$ . A solução deste sistema para quando os ângulos internos do triângulo medem  $45^\circ$ ,  $45^\circ$  e  $90^\circ$  pode ser facilmente obtida através da solução do bilhar quadrado. Podemos formar um triângulo retângulo tomando  $x, y \in (0, 1)$  e restringindo a área para satisfazer  $y \leq x$  com a linha  $y = x$  definindo outra parede de potencial (veja figura 1(a)). Enquanto que as autofunções do tipo (2.28) não satisfazem às condições de contorno necessárias, uma combinação linear de pares de autofunções degeneradas do tipo

$$\Psi_{n_x, n_y}(\mathbf{r}) \propto \psi_{n_x, n_y}(\mathbf{r}) - \psi_{n_y, n_x}(\mathbf{r}) \quad (2.29)$$

com  $n_x < n_y$  se anula nas fronteiras e portanto são as funções de onda apropriadas. As autoenergias correspondentes são dadas por  $k = \pi \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$  com a restrição  $n_x < n_y$ . Deste modo, um grande número de degenerescências óbvias do bilhar quadrado são removidas e algumas das degenerescências acidentais também são eliminadas. Além disso, todos os estados onde  $n_x = n_y$  são eliminadas do espectro do triângulo retângulo. Podemos verificar



isso ao compararmos as figuras 7(a) e 12(a). Os picos correspondentes aos estados  $(1, 1)$  e  $(2, 2)$ , por exemplo, não estão presentes na segunda figura.

Diferentemente do caso anterior, agora não sabemos como obter o ângulo de incidência de modo a separar corretamente as componentes  $k_x$  e  $k_y$ . O procedimento utilizado neste caso, e para todo o trabalho, foi o seguinte: após obtido o valor de  $k$  ressonante, calcular a matriz  $\mathbb{M}$  através de (2.26) para os elementos fora da diagonal e através de (2.23) para os elementos da diagonal, e obter a função de onda para  $\theta \in [0, 360)$  com um passo  $\Delta\theta$  arbitrário. Em seguida, plotar a intensidade média  $\langle |\psi(\mathbf{r})|^2 \rangle$  em função de  $\theta$ . Tal gráfico apresentará diversos picos, como mostra a figura 13. Em geral, o ângulo que produzir a maior intensidade média  $\langle |\psi(\mathbf{r})|^2 \rangle$  é o ângulo correto de incidência que gera o autoestado correto.

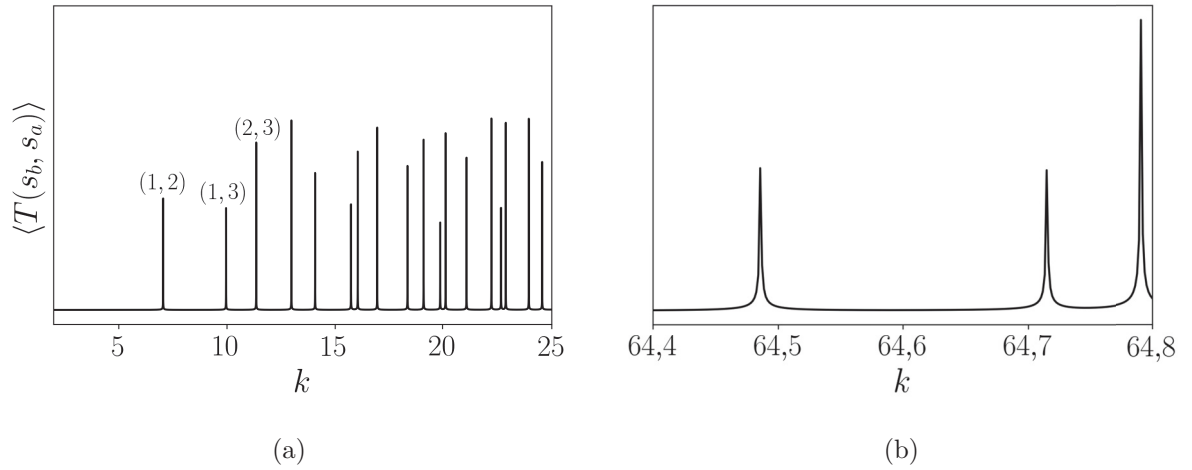


Figura 12 – Gráfico da média dos elementos da matriz  $T$ , com excessão dos elementos da diagonal em função do número de onda  $k$ . Os três primeiros autoestados  $(n_x, n_y)$  estão indicados em (a). Os picos correspondentes aos estados exibidos nas figuras 15, 16 e 17 estão indicados em (b).

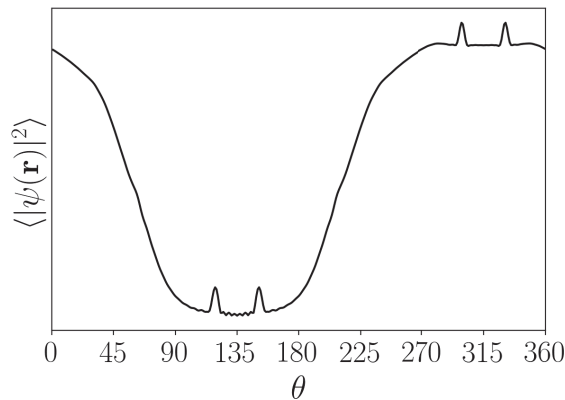


Figura 13 – Gráfico da média espacial de  $\psi(\mathbf{r})$  em função do ângulo de incidência  $\theta$  para  $k = 64,7146$ . O pico de maior intensidade está localizado em  $\theta = 299^\circ$ .



Na figura 14 vemos o caso em que o número de onda da onda incidente não corresponde a um  $k$  ressonante.  $\psi(\mathbf{r}) = 0$  na região interna do bilhar e somente os elementos na vizinhança da diagonal da matriz  $T$  são apreciáveis. Já nas figuras 15, 16 e 17 temos os casos em que a energia de  $\varphi$  é uma autoenergia do bilhar triângulo retângulo, onde esta possui uma degenerescência de grau três. Como existe a restrição  $n_x < n_y$ , todas as degenerescências do triângulo retângulo são acidentais. Além disso, na figura 18 encontra-se a combinação linear (2.29) para os pares  $(n_x, n_y)$  igual a  $(14, 15)$ ,  $(10, 18)$ ,  $(13, 16)$ ,  $(5, 20)$ ,  $(8, 19)$ , as quais correspondem, respectivamente, às soluções exibidas nas figuras 15(a), 16(a), 17(a), 17(b) e 17(c).

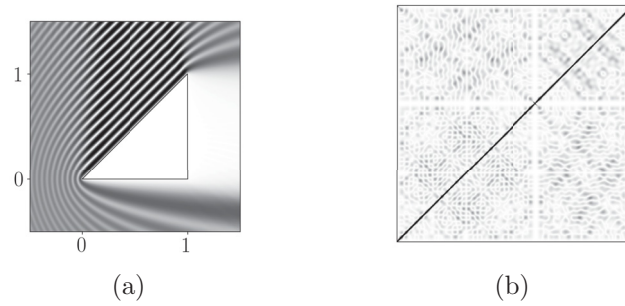


Figura 14 – Gráficos de densidade de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|$  e (b)  $|T|^2$  para  $k = 64,60$ .

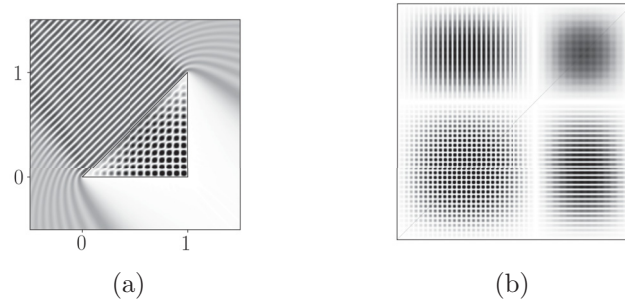


Figura 15 – Gráficos de densidade de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b)  $|T|^2$  para  $k = 64,4854$  ( $n_x = 14$ ,  $n_y = 15$ ) e  $\theta = 315^\circ$ .

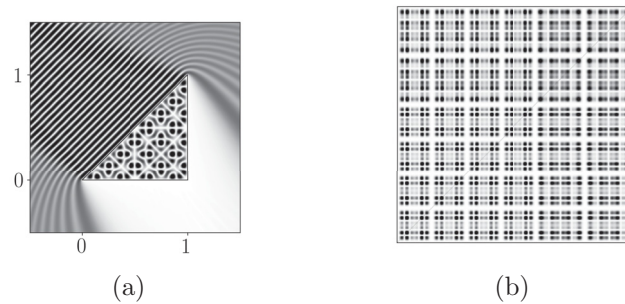


Figura 16 – Gráficos de densidade de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b)  $|T|^2$  para  $k = 64,7146$  ( $n_x = 10$ ,  $n_y = 18$ ) e  $\theta = 299^\circ$ .

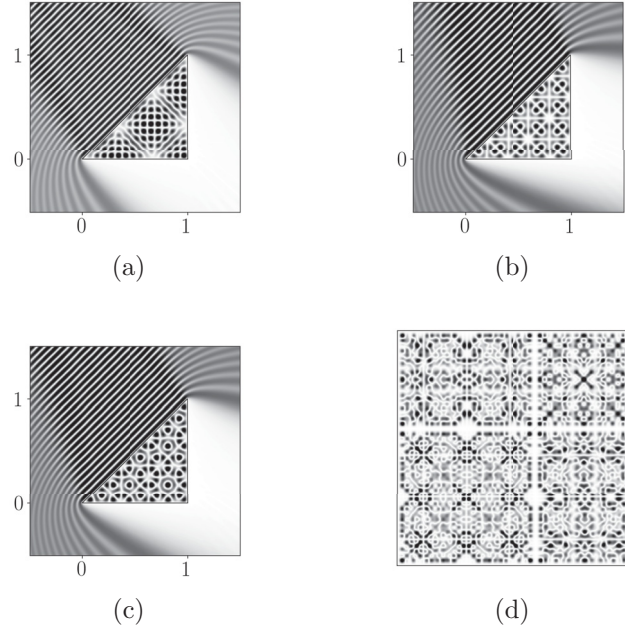


Figura 17 – (a)-(c): gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  com (a)  $\theta = 321^\circ$ , (b)  $\theta = 346^\circ$  e (c)  $\theta = 337^\circ$ ; (d) gráfico de densidade de  $|T|^2$ . Em todos os casos  $k = 64,7910$  ( $n_x = 13$ ,  $n_y = 16$ ).

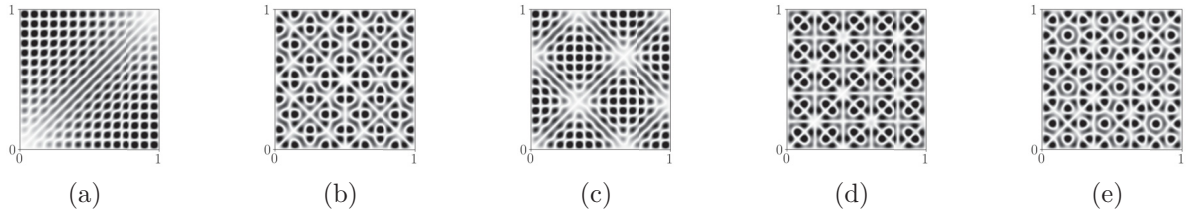


Figura 18 – Gráficos de densidade de  $|\Psi_{n_x, n_y}(\mathbf{r})|^2$  com (a)  $(n_x, n_y) = (14, 15)$ , (b)  $(n_x, n_y) = (10, 18)$ , (c)  $(n_x, n_y) = (13, 16)$ , (d)  $(n_x, n_y) = (5, 20)$ , (e)  $(n_x, n_y) = (8, 19)$ .

### 2.4.3 Otimização de cavidades para dispositivos coletores de fótons

A pesquisa em optoeletrônica tem se consolidado como uma área importante em vários campos da tecnologia. Exemplo disto é sua crescente utilização na construção de dispositivos como detectores. LED's, células solares, etc [73]. Por serem mais leves e terem menor custo, tanto em termos de matéria-prima utilizada quanto de produção, a indústria de fotodetectores e células fotovoltaicas orgânicas tem destaque neste crescimento, sendo que um dos temas mais importantes na pesquisa destes dispositivos é o de como otimizar sua eficiência [74, 75].

Em 2000 foi demonstrado que adicionar um tipo de “grade” (máscara refletora com pequenas aberturas periódicas) sobre a camada orgânica fotoativa pode aumentar a

eficiência quântica interna do dispositivo fotodetector em aproximadamente 30%, na região do espectro solar [76]. A ideia por trás dessa proposição é a de que, no dispositivo sem a grade, a luz incide uma vez na placa refletora e, se não absorvido, o fóton se perde. Quando é acrescentada a grade à estrutura, os fótons que adentram o dispositivo são aprisionados, criando-se então a possibilidade de múltiplas reflexões entre as placas, o que aumenta as chances de eles serem absorvidos pelo material orgânico, uma vez que passarão mais vezes através desta camada.

São muitas as variáveis envolvidas para o bom desempenho de qualquer tipo de dispositivo. Um problema que merece atenção antes da fabricação destas estruturas é o cálculo de suas dimensões otimizadas. Neste sentido, mostraremos aqui o estudo realizado por Macedo et. al. [62] para a modelagem teórica do arranjo experimental mostrado na figura 19(a) através do MCP, apenas como exemplo de como este método, que foi desenvolvido para soluções de espalhamento quântico, pode ser aplicado em situações reais. Estes resultados foram utilizados efetivamente na fabricação de dispositivos fotodetectors, como é mostrado na ref. [62].

Utilizando uma onda incidente da forma  $\varphi(\mathbf{r}) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ , a equação de onda do campo elétrico, para uma frequência  $\omega$  fixa, toma a forma

$$\nabla^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) + \epsilon\mu\omega^2 \mathbf{E}(\mathbf{r}) = 0,$$

com  $\mathbf{E}(\mathbf{r}(s)) = 0$  na superfície das placas. Como a equação acima apresenta a forma da equação de Helmholtz com condição de contorno de Dirichlet, é válida a aplicação do MCP no tratamento do problema. Como foi considerado somente o caso bidimensional, é possível resolver apenas o caso escalar da equação de Helmholtz.

Na figura 19(c) está exibida, para alguns valores de  $s$ , isto é, a distância entre as aberturas na máscara refletora, em unidades de  $d$ , que mede a distância entre a máscara e a placa refletora, os gráficos de densidade de  $|E(\mathbf{r})|^2$  na região indicada na figura 19(b). Neste caso, as regiões claras correspondem aos máximos de  $|E(\mathbf{r})|^2$  e as regiões escuras aos mínimos. Com relação ao comprimento de onda da onda incidente, foi utilizado  $\lambda = d$ . Como a região de camada ativa tem uma espessura de 500 nm em todas as amostras produzidas, foi assumido em todos os cálculos que a distância entre a máscara e a placa refletora (veja figura 19(a)) também é  $d$ . Claramente vemos que ao variar  $s$ , é obtido diferentes distribuições de campo na cavidade. De muitas simulações, Macedo et. al. observaram que para os seus propósitos,  $s = 15\lambda$  é a melhor configuração geométrica para o dispositivo. Neste caso, a distribuição do campo através da estrutura é mais uniforme, o que faz com que seja otimizada a área utilizada do dispositivo, pois, uma parcela maior do material fotoativo é exposta ao campo. Portanto, é esperado obter eficiências mais altas neste caso, o que foi verificado no estudo em [62].

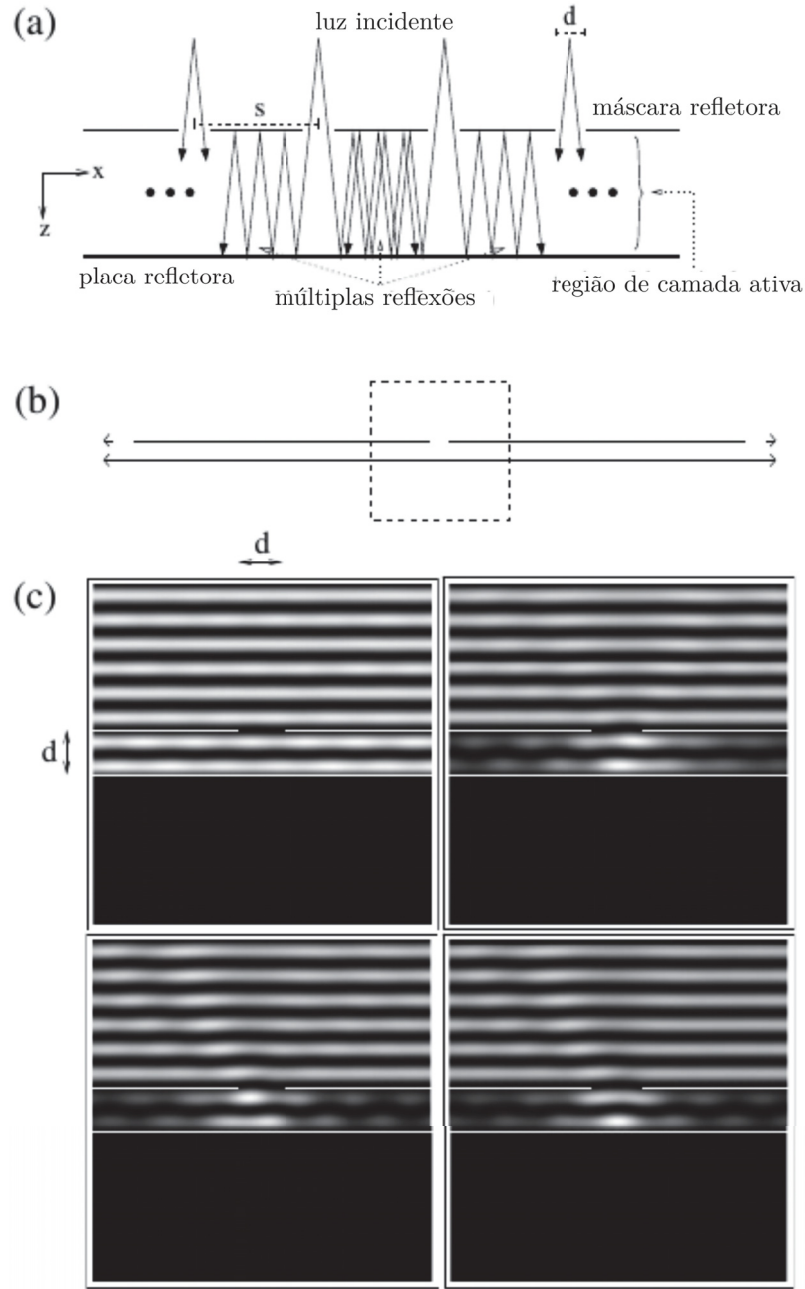


Figura 19 – (a) Representação esquemática do comportamento da luz no plano  $x-z$  do dispositivo. (c) Gráficos de densidade das distribuições de campo simuladas, na região indicada em (b), para uma onda plana incidente de  $\lambda = d = 500$  nm. Os painéis representam no sentido anti-horário:  $s = 15d$ ,  $s = 40d$ ,  $s = 50d$  e  $s = 30d$ . Figura retirada de [62].

## 2.5 Histórico das simulações numéricas

Todas as simulações numéricas realizadas neste trabalho foram feitas ou em máquinas de cálculo disponibilizadas pelo Departamento de Física da Universidade Federal do Paraná, ou em máquinas de cálculo disponibilizadas pelo Laboratório Central de Processamento de Alto Desempenho (LCPAD). O sistema operacional de ambas é o Linux. Nas primeiras foram realizados simulações mais simples, como calcular o espectro de energias

com um intervalo em  $k$  pequeno e calcular as autofunções. Já no LCPAD foram calculados o espectro de energias para regiões mais extensas, que será visto no próximo capítulo.

A implementação numérica do MCP foi realizada primeiramente pelo Prof. Fabio Marcel Zanetti na linguagem Fortran 77, como parte do desenvolvimento de seu curso de mestrado. O Prof. Fabio me forneceu tais programas durante a Iniciação Científica e durante essa época e durante o desenvolvimento do mestrado, aprimorei tais programas, reescrevendo-os na linguagem Fortran 90 e utilizando a linguagem Python para otimizar a obtenção do espectro de energias e dos ângulos corretos de incidência da onda externa no bilhar.

### 3 Dinâmica dos níveis de energia do bilhar de Sinai

Neste capítulo iremos estudar relação entre a dinâmica dos níveis de energia, também chamada de movimento paramétrico dos autovalores, do bilhar de Sinai totalmente dessimetrizado com suas respectivas autofunções. Existem muitos estudos que tratam da dinâmica dos níveis de energia em bilhares, no entanto, nestes estudos, nada se fala sobre o comportamento da função de onda dentro dessas cavidades. Tal estudo é de extrema importância tecnológica, uma vez que é necessário conhecer o comportamento da partícula (elétron, fóton, etc) que está confinada em uma determinada cavidade ao desenvolver algum dispositivo.

O bilhar de Sinai está exibido na figura 20(a) e as linhas pontilhadas representam as suas linhas de simetria. As funções de onda, isto é, os autoestados do bilhar de Sinai possuem uma paridade definida com relação à cada linha de simetria. Logo, como a paridade é um bom número quântico, iremos estudar o bilhar de Sinai totalmente dessimetrizado (veja a região tracejada da figura 20(b)) de modo a não haver interação (cruzamento) entre os níveis de energia de paridades diferentes. A geometria do bilhar, isto é, o comprimento de seus lados, é definida pelos parâmetros  $\alpha$ ,  $r$  e pela sua área  $A$ ,

$$\begin{aligned}\ell_1 &= \sqrt{(2A + \beta r^2) \tan \alpha} - r, \\ \ell_2 &= \sqrt{\frac{2A + \beta r^2}{\tan \alpha}}, \\ \ell_3 &= \sqrt{\frac{2A + \beta r^2}{\sin \alpha \cos \alpha}} - r,\end{aligned}$$

que manteremos constante e igual a  $A = 1/2$  para estudarmos apenas a influência da

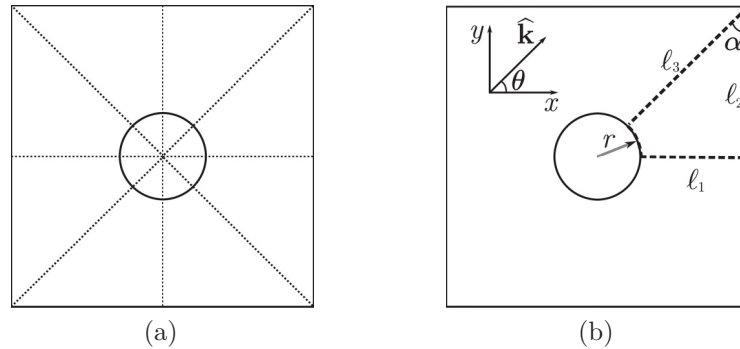


Figura 20 – O bilhar de Sinai consiste em um quadrado com um disco de raio  $r$  em seu centro. As linhas pontilhadas correspondem às linhas de simetria do bilhar e  $\hat{\mathbf{k}}$  e  $\theta$  são o versor de onda da onda incidente e seu ângulo de incidência, respectivamente.

variação dos ângulos e do raio no espectro de energias e com  $\beta = \pi/2 - \alpha$ . No limite  $r \rightarrow 0$  o bilhar de Sinai totalmente dessimetrizado tende ao bilhar triângulo retângulo.

Como estamos interessados somente na morfologia da função de onda dos autoestados, mostraremos apenas a solução interna de  $\psi(\mathbf{r})$ , onde as regiões escuras correspondem aos pontos de maior intensidade da densidade de probabilidade  $|\psi(\mathbf{r})|^2$ .

### 3.1 Raio fixo, ângulos variáveis

Primeiramente manteremos o raio  $r$  constante para estudarmos a influência da variação dos ângulos internos, definidos por  $\alpha$ , em suas autofunções. Para tal, utilizaremos as propriedades da matriz  $T$  discutidas na seção 2.2. A dinâmica dos níveis de energia, em função de  $\alpha$ , para um raio igual a  $r = 0,2$  para dois intervalos de energia está exibida na figura 21. Imediatamente notamos que a densidade de níveis de energia para um mesmo intervalo é maior para regiões mais elevadas do espectro, isto é, com energias mais altas, quando comparada a regiões mais baixas. Também notamos que, apesar da interação entre os níveis de energia ser grande, eles variam em torno de uma mesma energia, uma vez que a área do bilhar permanece constante. Alguns níveis, em certas partes do espaço  $k \times \alpha$ , possuem uma dinâmica acentuada, ou um perfil “diagonal” (estruturas tipo sóliton), e elas tendem a se aproximar mais de outros níveis, causando uma interação mais intensa entres eles. Iremos discutir a seguir a razão deste comportamento analisando a morfologia das autofunções, indicadas nas figuras 22, 23, 24, 25.

Nas figuras 22, 23 e 24 encontram-se os detalhes das regiões indicadas na figura 21, respectivamente, e seus autoestados. Os autoestados associados às famílias cuja evolução

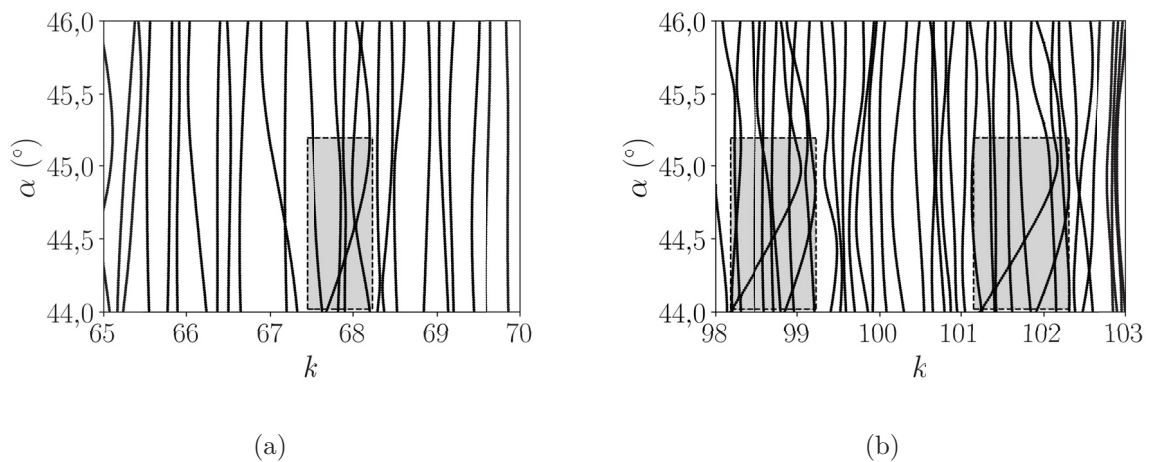


Figura 21 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  como função de  $k$  e  $\alpha$  com  $r = 0,2$ . A região sombreada em (a) está exibida na figura 22 e as regiões sombreadas na figura (b) estão exibidas nas figuras 23 (esquerda) e 24 (direita).



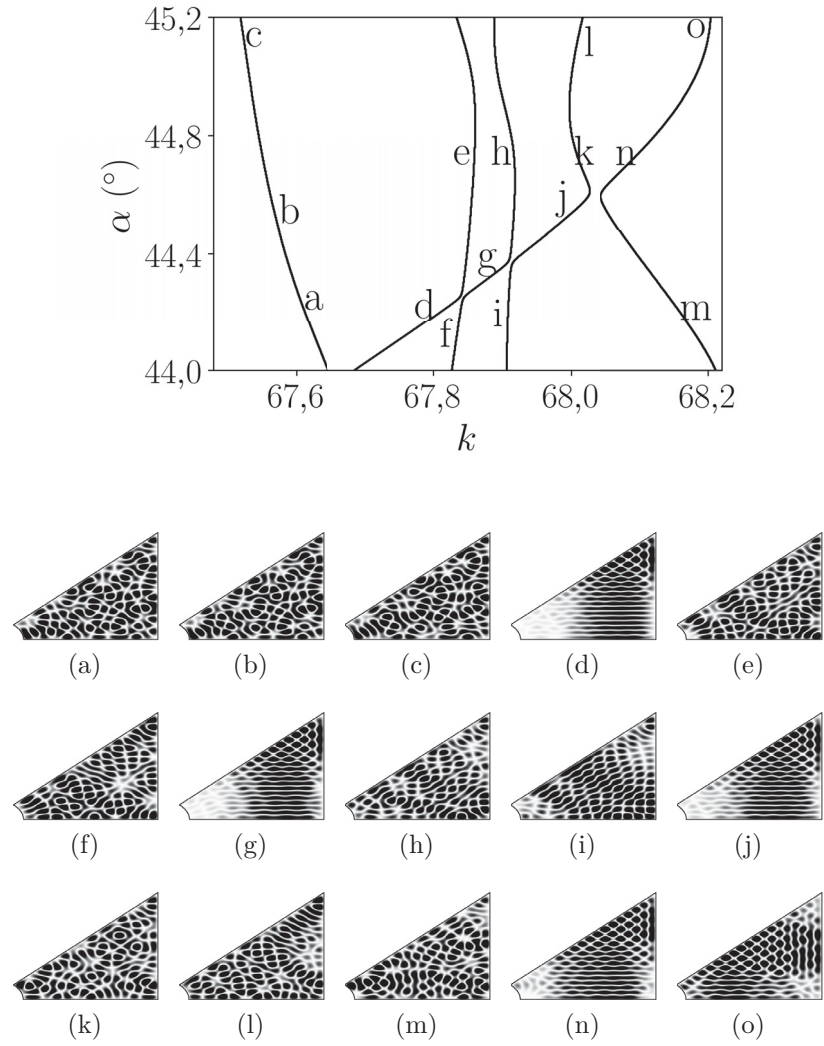


Figura 22 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $\alpha$  com  $r = 0,2$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 67,5999$  e  $\alpha = 44,2^\circ$ ; (b)  $k = 67,5594$  e  $\alpha = 44,5^\circ$ ; (c)  $k = 67,5129$  e  $\alpha = 45,1^\circ$ ; (d)  $k = 67,7735$  e  $\alpha = 44,15^\circ$ ; (e)  $k = 67,8528$  e  $\alpha = 44,7^\circ$ ; (f)  $k = 67,8305$  e  $\alpha = 44,15^\circ$ ; (g)  $k = 67,8648$  e  $\alpha = 44,3^\circ$ ; (h)  $k = 67,9106$  e  $\alpha = 44,7^\circ$ ; (i)  $k = 67,9017$  e  $\alpha = 44,15^\circ$ ; (j)  $k = 67,9767$  e  $\alpha = 44,5^\circ$ ; (k)  $k = 68,0029$  e  $\alpha = 44,7^\circ$ ; (l)  $k = 68,0150$  e  $\alpha = 45,25^\circ$ ; (m)  $k = 68,1603$  e  $\alpha = 44,15^\circ$ ; (n)  $k = 68,0772$  e  $\alpha = 44,7^\circ$  e (o)  $k = 68,1970$  e  $\alpha = 45,25^\circ$ .

se dá sem muita variação na energia (evolução 22(a), 22(b) e 22(c), por exemplo) possuem uma morfologia da função de onda desordenada, não-localizada, logo, existe uma maior facilidade em acomodar a função de onda à nova geometria. Já para as regiões onde a evolução das famílias é acentuada, a função de onda possui um caráter ordenado, localizado (os autoestados 22(d), 23(a), 23(i), 24(a), 24(g), por exemplo) e deve se ater a certos vínculos, isto é, deve manter a forma organizada da função de onda, para que o estado continue a existir na nova geometria, fazendo com que a variação em sua energia (ou comprimento de onda) seja grande. Esses estados estão associados aos estados cicatrizados (*scars*) do bilhar triângulo retângulo, que por sua vez estão associados às órbitas periódicas



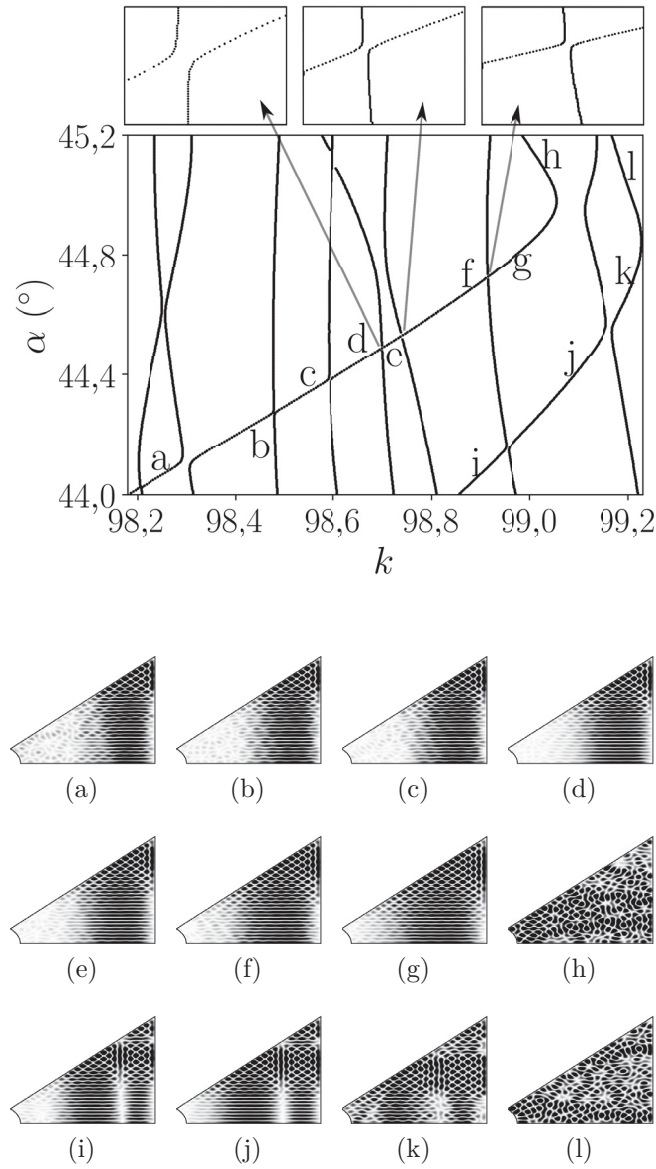


Figura 23 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $\alpha$  com  $r = 0,2$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 98,2296$  e  $\alpha = 44,05^\circ$ ; (b)  $k = 98,4477$  e  $\alpha = 44,25^\circ$ ; (c)  $k = 98,5315$  e  $\alpha = 44,33^\circ$ ; (d)  $k = 98,6547$  e  $\alpha = 44,45^\circ$ ; (e)  $k = 98,7041$  e  $\alpha = 44,5^\circ$ ; (f)  $k = 98,8878$  e  $\alpha = 44,7^\circ$ ; (g)  $k = 98,9670$  e  $\alpha = 44,8^\circ$ ; (h)  $k = 99,0150$  e  $\alpha = 45,1^\circ$ ; (i)  $k = 98,8820$  e  $\alpha = 44,05^\circ$ ; (j)  $k = 99,0753$  e  $\alpha = 44,38^\circ$ ; (k)  $k = 99,2017$  e  $\alpha = 44,7^\circ$  e (l)  $k = 99,1860$  e  $\alpha = 45,05^\circ$ .

instáveis do sistema análogo, que serão analisadas posteriormente neste trabalho. O fato de certos estados cicatrizados do triângulo retângulo se manterem mesmo para o bilhar de Sinai se dá pois os mesmos não possuem uma porção apreciável da função de onda na região do vértice perturbado pelo aumento do raio  $r$ . Isso ficará mais claro quando analisarmos a influência do raio na dinâmica dos níveis de energia.

Uma vez que o bilhar de Sinai possui uma dinâmica clássica completamente caótica e não possui simetrias adicionais, segundo o teorema adiabático, os níveis de energia não

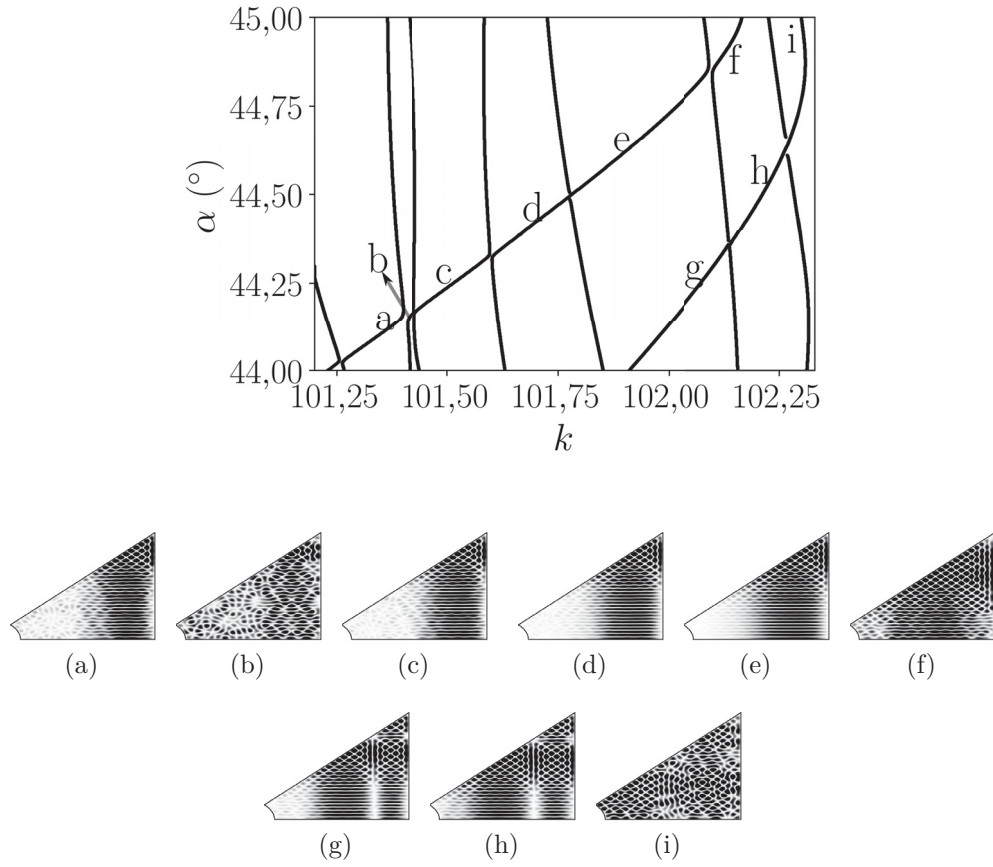


Figura 24 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $\alpha$  com  $r = 0,2$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 101,338$  e  $\alpha = 44,1^\circ$ ; (b)  $k = 101,403$  e  $\alpha = 44,15^\circ$ ; (c)  $k = 101,476$  e  $\alpha = 44,22^\circ$ ; (d)  $k = 101,672$  e  $\alpha = 44,4^\circ$ ; (e)  $k = 101,876$  e  $\alpha = 44,6^\circ$ ; (f)  $k = 102,138$  e  $\alpha = 44,93^\circ$ ; (g)  $k = 102,039$  e  $\alpha = 44,2^\circ$ ; (h)  $k = 102,207$  e  $\alpha = 44,5^\circ$  e (i)  $k = 102,297$  e  $\alpha = 44,93^\circ$ .

podem cruzar. Nas figuras 23 e 24 existem diversas regiões onde os níveis de energia aparentam cruzar, porém, ao ampliarmos a região vemos que, na verdade, há a repelência dos níveis de energia, uma característica do espectro de bilhares cuja dinâmica clássica é caótica. Nessas repelências agudas (*sharp avoided crossing*), onde os níveis de energia chegam muito próximos uns dos outros, eles sofrem uma transição diabática (não adiabática) [77], trocando as morfologias das suas funções de onda entre si. Tal fenômeno pode ser observado nas figuras 22(d), 22(g) e 22(f), 22(e). Isto permite que, nos casos onde há sucessivas repelências ao longo de uma linha fictícia (comportamento tipo sólito), os autoestados se “propagam” ao longo do espectro, até regiões próxima de  $\alpha = 45^\circ$ . Estes estados estão associados à diferentes estados cicatrizados e eles são robustos, com uma maior longevidade no espectro, o que ficará mais claro com a análise da relação dos estados cicatrizados com as órbitas periódicas do triângulo retângulo.

Na figura 25 encontra-se um zoom na região  $k \in [98,93, 99,13]$  e  $\alpha \in [44,78^\circ, 45,15^\circ]$  da figura 23. Esta região corresponde à evolução do autoestado 23(g) para 23(h). O que vemos neste caso é que conforme o ângulo  $\alpha$  se aproxima de  $45^\circ$ , o autoestado passa a

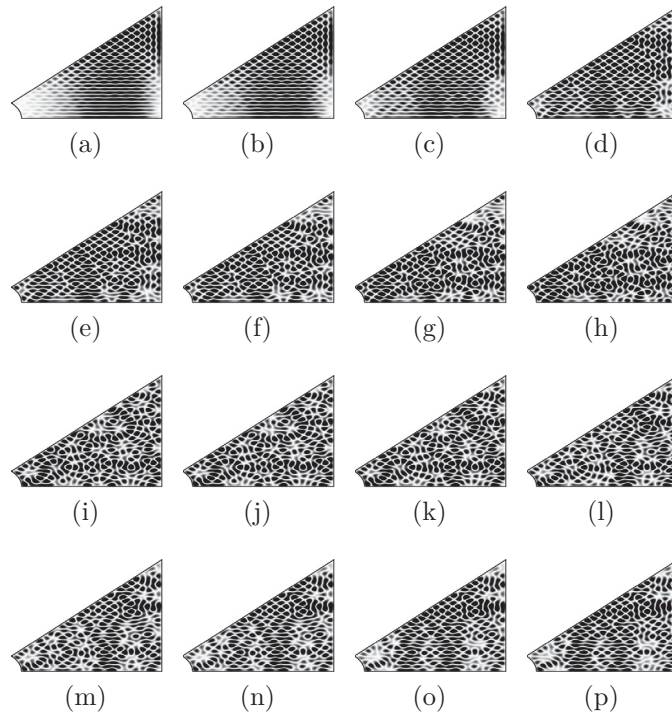
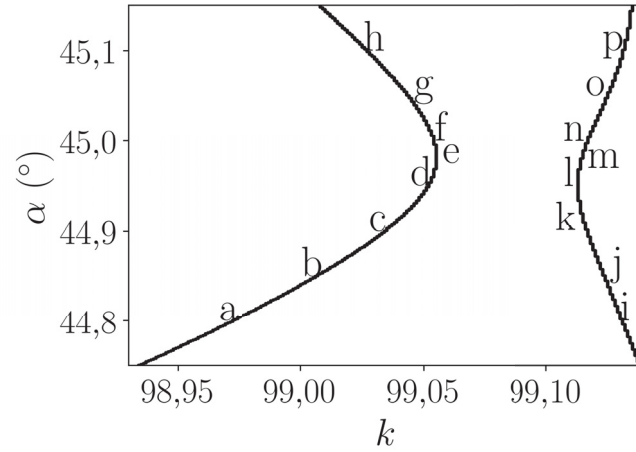


Figura 25 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $\alpha$  com  $r = 0,2$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 98,9670$  e  $\alpha = 44,8^\circ$ ; (b)  $k = 99,0007$  e  $\alpha = 44,85^\circ$ ; (c)  $k = 99,0283$  e  $\alpha = 44,9^\circ$ ; (d)  $k = 99,0450$  e  $\alpha = 44,95^\circ$ ; (e)  $k = 99,0470$  e  $\alpha = 44,975^\circ$ ; (f)  $k = 99,0447$  e  $\alpha = 45,0^\circ$ ; (g)  $k = 99,0323$  e  $\alpha = 45,05^\circ$ ; (h)  $k = 99,0150$  e  $\alpha = 45,1^\circ$ ; (i)  $k = 99,1185$  e  $\alpha = 44,8^\circ$ ; (j)  $k = 99,1110$  e  $\alpha = 44,85^\circ$ ; (k)  $k = 99,1042$  e  $\alpha = 44,9^\circ$ ; (l)  $k = 99,1012$  e  $\alpha = 44,95^\circ$ ; (m)  $k = 99,1032$  e  $\alpha = 44,975^\circ$ ; (n)  $k = 99,1075$  e  $\alpha = 45,0^\circ$ ; (o)  $k = 99,1165$  e  $\alpha = 45,05^\circ$  e (p)  $k = 99,1232$  e  $\alpha = 45,1^\circ$ .

ocupar uma região maior do espaço, até que, depois de  $\alpha \approx 45^\circ$  ele perde completamente seu caráter ordenado.

Agora vamos estudar a influência do raio  $r$  nessas características que acabamos de discutir. Para isto, iremos analisar as figuras 26 e 27. Na primeira encontra-se um

intervalo maior de  $k$  e  $\alpha$ , com relação aos casos mostrados na figura 21, para diferentes valores de raio  $e$ , na segunda, os detalhes indicados na primeira figura e seus respectivos autoestados. Podemos notar imediatamente que os sólitons são estruturas comuns aos espectros e repetem-se com certa frequência. Para o espectro onde o raio é nulo, figura 26(a), os níveis de energia possuem uma simetria em relação ao ângulo  $\alpha = 45^\circ$ , devida à simetria que o triângulo retângulo possui neste ângulo. Sobre  $\alpha = 45^\circ$ , onde a dinâmica clássica do bilhar é regular, observamos a existência de degenerescências, com os níveis tocando-se. Para os casos onde o raio é diferente de zero, figuras 26(b) e 26(c), a simetria do triângulo é quebrada e observamos que para  $\alpha > 45^\circ$  os sólitons são mantidos com maior dificuldade, praticamente desaparecendo com o aumento do raio. Para  $\alpha < 45^\circ$  os sólitons se mantêm como no caso do raio nulo. E nestes casos não observamos mais as degenerescências sobre  $\alpha = 45^\circ$ .

Observando os autoestados para o caso do raio nulo, figuras 27(a) a 27(e), percebemos que os estados com  $\alpha > 45^\circ$  têm as mesmas características que os estados com

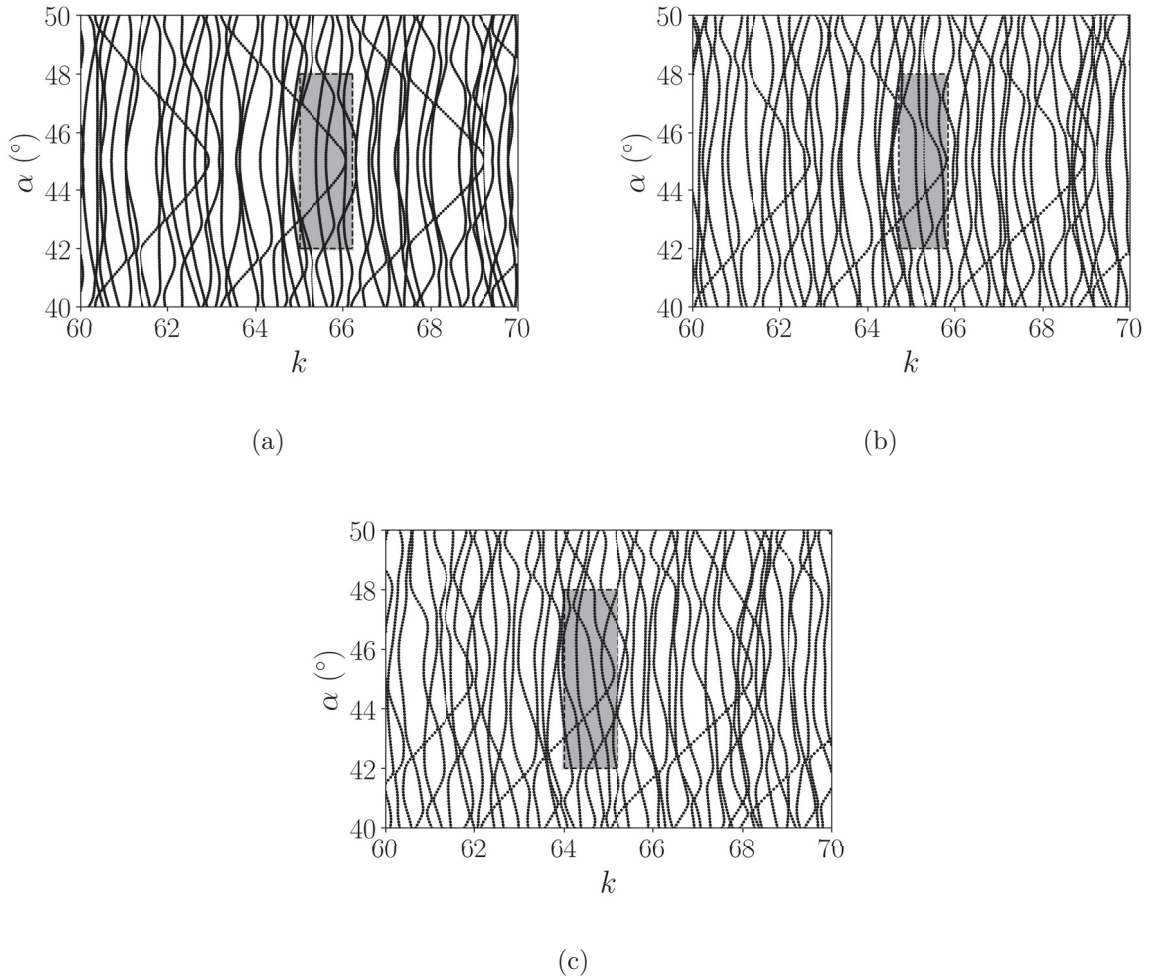


Figura 26 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  como função de  $k$  e  $\alpha$  com (a)  $r = 0,0$ , (b)  $r = 0,1$  e (c)  $r = 0,2$ .

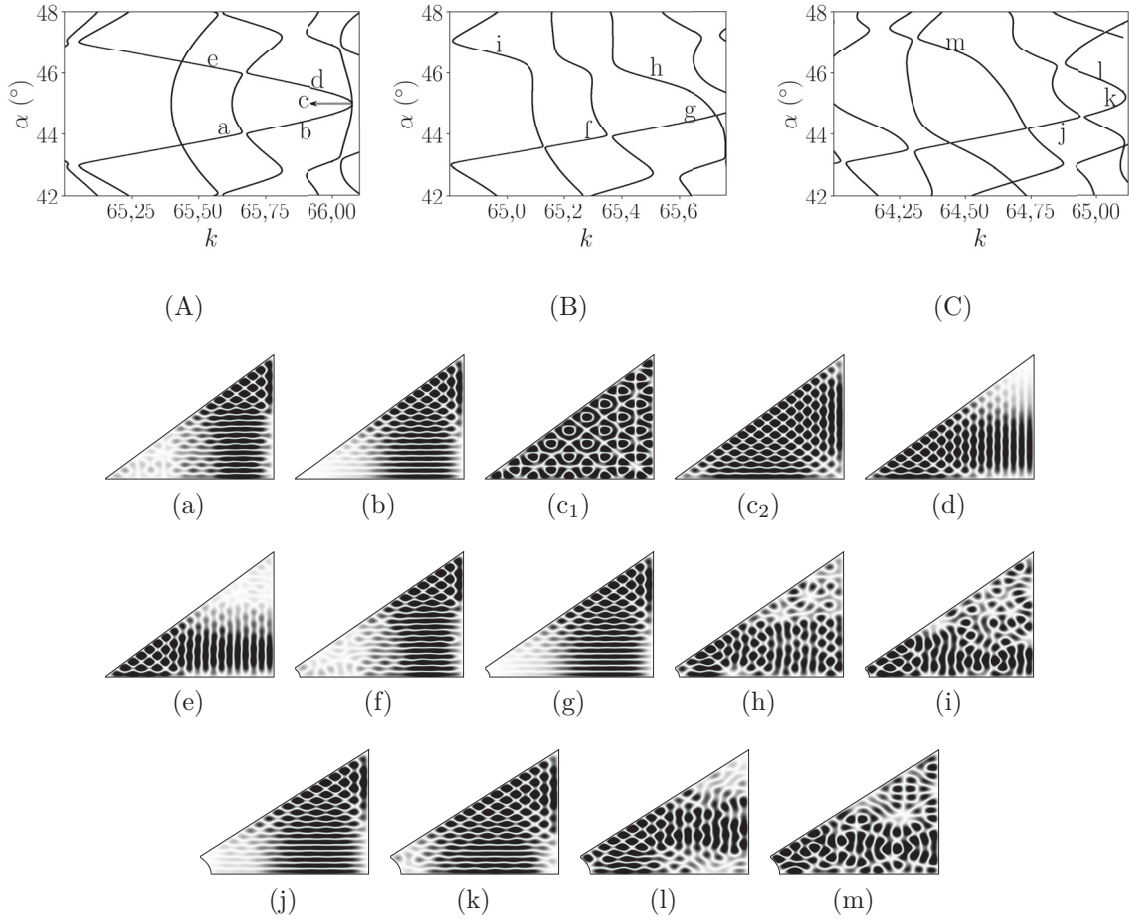


Figura 27 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $\alpha$  para diferentes valores de raio:  $r_A = 0,0$ ,  $r_B = 0,1$  e  $r_C = 0,2$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 65,5931$  e  $\alpha = 43,9^\circ$ ; (b)  $k = 65,8763$  e  $\alpha = 44,4^\circ$ ; (c)  $k = 66,0740$  e  $\alpha = 45^\circ$ ; (d)  $k = 65,9246$  e  $\alpha = 45,5^\circ$ ; (e)  $k = 65,5340$  e  $\alpha = 46,2^\circ$ ; (f)  $k = 65,2702$  e  $\alpha = 43,8^\circ$ ; (g)  $k = 65,6166$  e  $\alpha = 44,4^\circ$ ; (h)  $k = 65,4992$  e  $\alpha = 45,8^\circ$ ; (i)  $k = 64,9623$  e  $\alpha = 46,6^\circ$ ; (j)  $k = 64,8522$  e  $\alpha = 44,4^\circ$ ; (k)  $k = 65,0315$  e  $\alpha = 44,8^\circ$ ; (l)  $k = 65,0060$  e  $\alpha = 45,8^\circ$  e (m)  $k = 64,4268$  e  $\alpha = 46,8^\circ$ .

$\alpha < 45^\circ$ , ambos associados a um mesmo tipo de estado cicatrizado (*scar*). Isso se dá devido à simetria na variação da geometria ao passar por  $45^\circ$ . Além disso, os sólitons migram para a direita/esquerda (região de maior/menor energia, isto é, menor/maior comprimento de onda) com o aumento/diminuição de  $\alpha$  até  $45^\circ$ , pois a parede vertical/horizontal, a qual seu perfil é associado, diminui/aumenta com a variação de  $\alpha$  e seu comprimento de onda também deve diminuir/aumentar para o estado ser acomodado na nova geometria. Notamos ainda que nesta região, sobre  $\alpha = 45^\circ$ , existe uma degenerescência de grau dois (figuras 27(c<sub>1</sub>) e 27(c<sub>2</sub>)). Para o raio não nulo, os estados que, para  $\alpha < 45^\circ$ , interagem com o vértice não perturbado ainda mantém o estado cicatrizado que gera o sóliton. Para  $\alpha > 45^\circ$  os estados interagem com o vértice perturbado, e portanto, não mantém a evolução do estado cicatrizado. A morfologia da função de onda desses estados se assemelha à do estado cicatrizado, porém a perturbação causada pela parte curva faz com que a evolução



do sóliton se perca.

A semelhança entre os três gráficos da figura 26 indica que as soluções do bilhar de Sinai estão associadas àquelas do triângulo retângulo, o que será verificado a seguir.

### 3.2 Raio variável, ângulos fixos

A dinâmica dos níveis de energia, em função de  $r$ , para três valores distintos de  $\alpha$  é mostrada na figura 28, e os detalhes indicados nesta figura e seus respectivos autoestados estão exibidos nas figuras 29, 30 e 31. Percebemos nas três situações como o espectro do bilhar de Sinai ( $r \neq 0$ ) é construído a partir da evolução do espectro do triângulo retângulo ( $r = 0$ ). Além disso, notamos que não existem famílias sendo criadas conforme  $r$  aumenta, o que indica que *todas* as soluções do bilhar de Sinai estão associadas à autoestados do triângulo retângulo. Notamos também que, assim como no caso anterior, os sólitons se repetem com uma certa frequência e que o número de sólitons para o mesmo intervalo de energia é maior quando  $\alpha = 44^\circ$ . Para o caso onde  $\alpha = 45^\circ$ , figura 28(b), observamos a

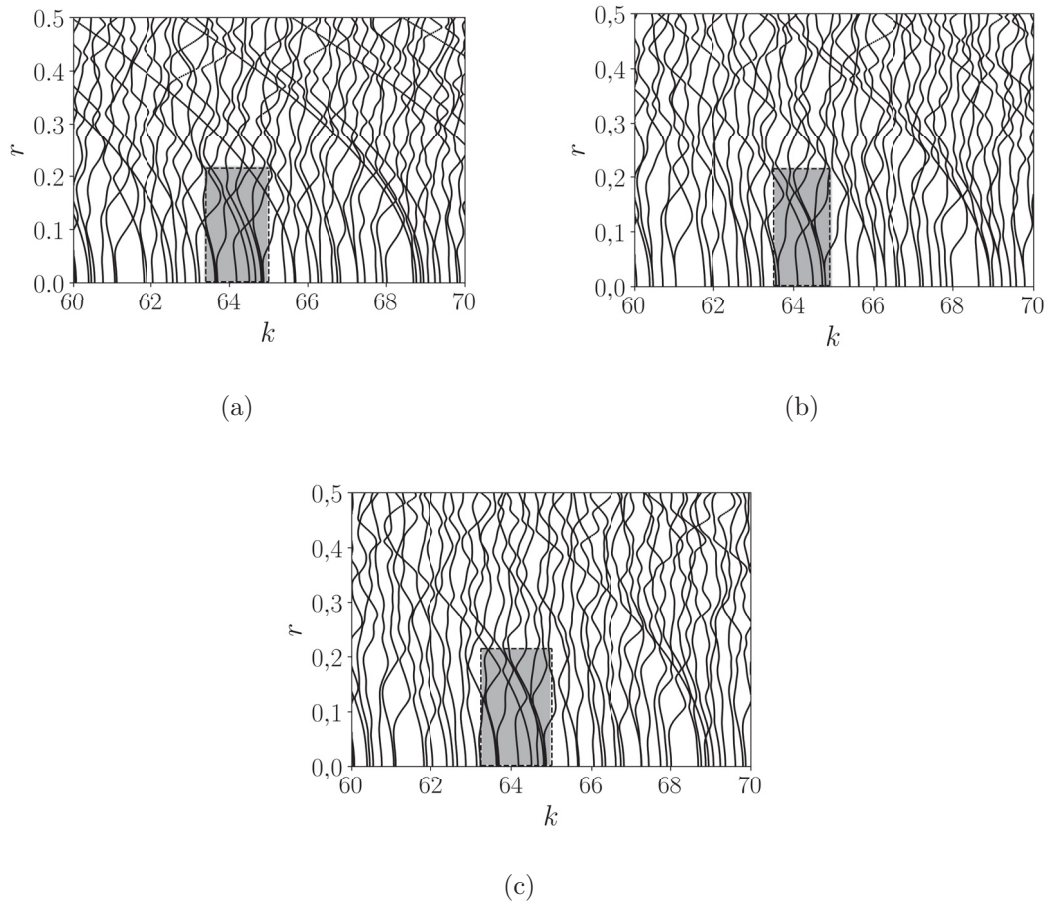


Figura 28 – Gráficos dos picos de  $\langle T(s_b, s_a) \rangle$  como função de  $k$  e  $r$  com (a)  $\alpha = 44^\circ$ , (b)  $\alpha = 45^\circ$  e (c)  $\alpha = 46^\circ$ .

presença de quebra de degenerescências duplas e triplas, ocasionadas pela perturbação da estrutura devido ao aumento do raio  $r$  e a consequente quebra da simetria que causava as degenerescências. Observamos também a presença de diversas estruturas tipo sóliton, com comportamentos diferentes quanto à logenvidade\*, produzidas por estados cicatrizados que estão associados à autoestados do triângulo retângulo, sendo que os estados cuja morfologia da função de onda possui um perfil mais “organizado” geram sólitons com

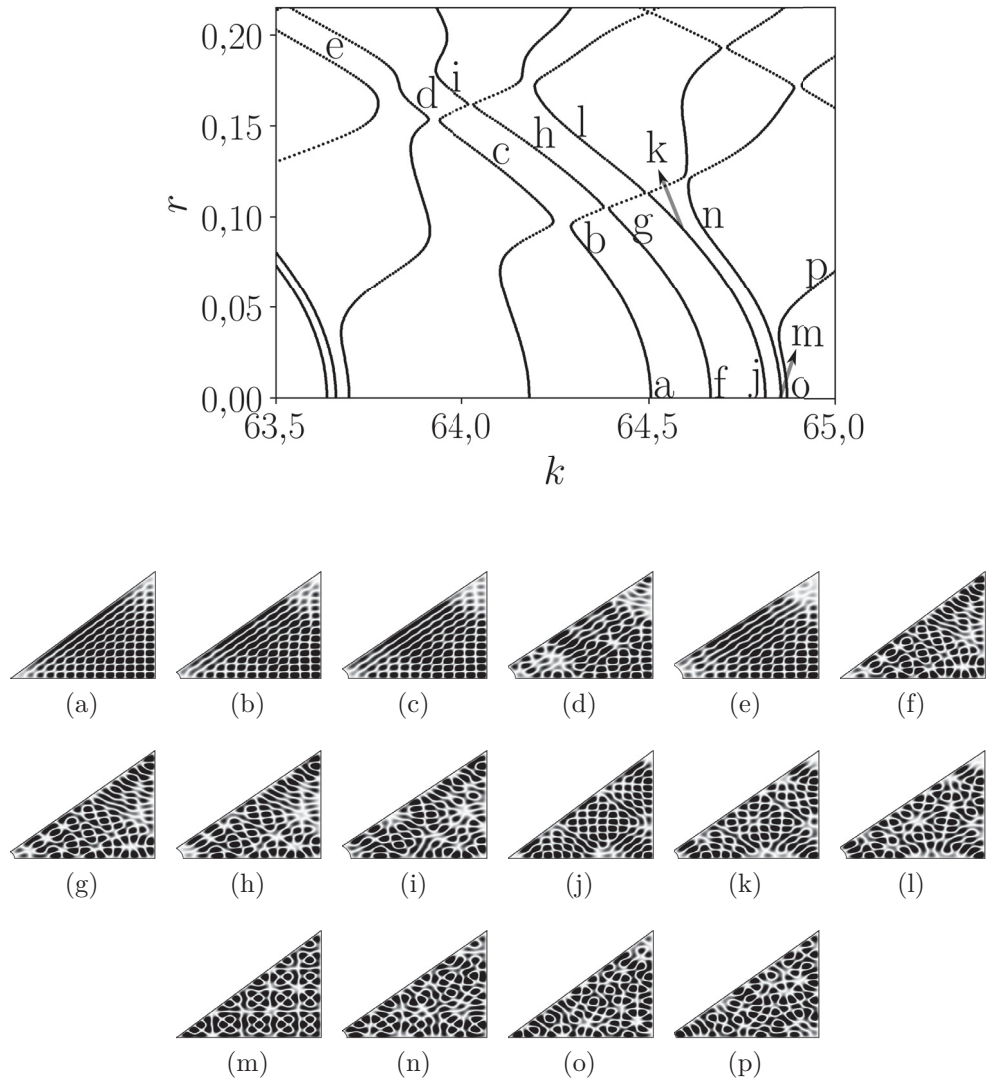


Figura 29 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $r$  para  $\alpha = 44^\circ$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 64,5051$  e  $r = 0,0$ ; (b)  $k = 64,3278$  e  $r = 0,084$ ; (c<sub>1</sub>) e (c<sub>2</sub>)  $k = 64,0464$  e  $r = 0,129$ ; (d)  $k = 63,8769$  e  $r = 0,16$ ; (e)  $k = 64,6349$  e  $r = 0,187$ ; (f)  $k = 64,6642$  e  $r = 0,0$ ; (g)  $k = 64,4572$  e  $r = 0,09$ ; (h)  $k = 64,1936$  e  $r = 0,138$ ; (i)  $k = 63,9751$  e  $r = 0,169$ ; (j)  $k = 64,8100$  e  $r = 0,0$ ; (k)  $k = 64,5515$  e  $r = 0,102$ ; (l)  $k = 64,3098$  e  $r = 0,144$ ; (m)  $k = 64,8520$  e  $r = 0,0$ ; (n)  $k = 64,6435$  e  $r = 0,094$ ; (o)  $k = 64,8683$  e  $r = 0,0$  e (p)  $k = 64,923$  e  $r = 0,058$ .

\*Neste caso, longevidade está relacionada com o quanto é preciso perturbar a geometria para que o comportamento tipo sóliton se perca.

maior facilidade e com maior longevidade. Por exemplo, o estado 29(a) gera o sóliton 29(b)–29(c)–29(d)–29(e), que possui maior longevidade que o sóliton gerado pelo estado 29(j), cuja morfologia possui um padrão mais complicado que o estado 29(a).

Observamos na figura 30 a quebra de uma degenerescência tripla causada pela perturbação do raio em um dos vértices. Os estados degenerados 30(j) do triângulo retângulo evoluem para os estados 30(k), 30(l) e 30(m) do bilhar de Sinai. Além disso, observamos também a quebra da degenerescência, quando  $r = 0$  e  $\alpha = 45^\circ$ , devido à variação do ângulo, ao compararmos a figura 30 com as figuras 29 e 31. Os estados 30(j)

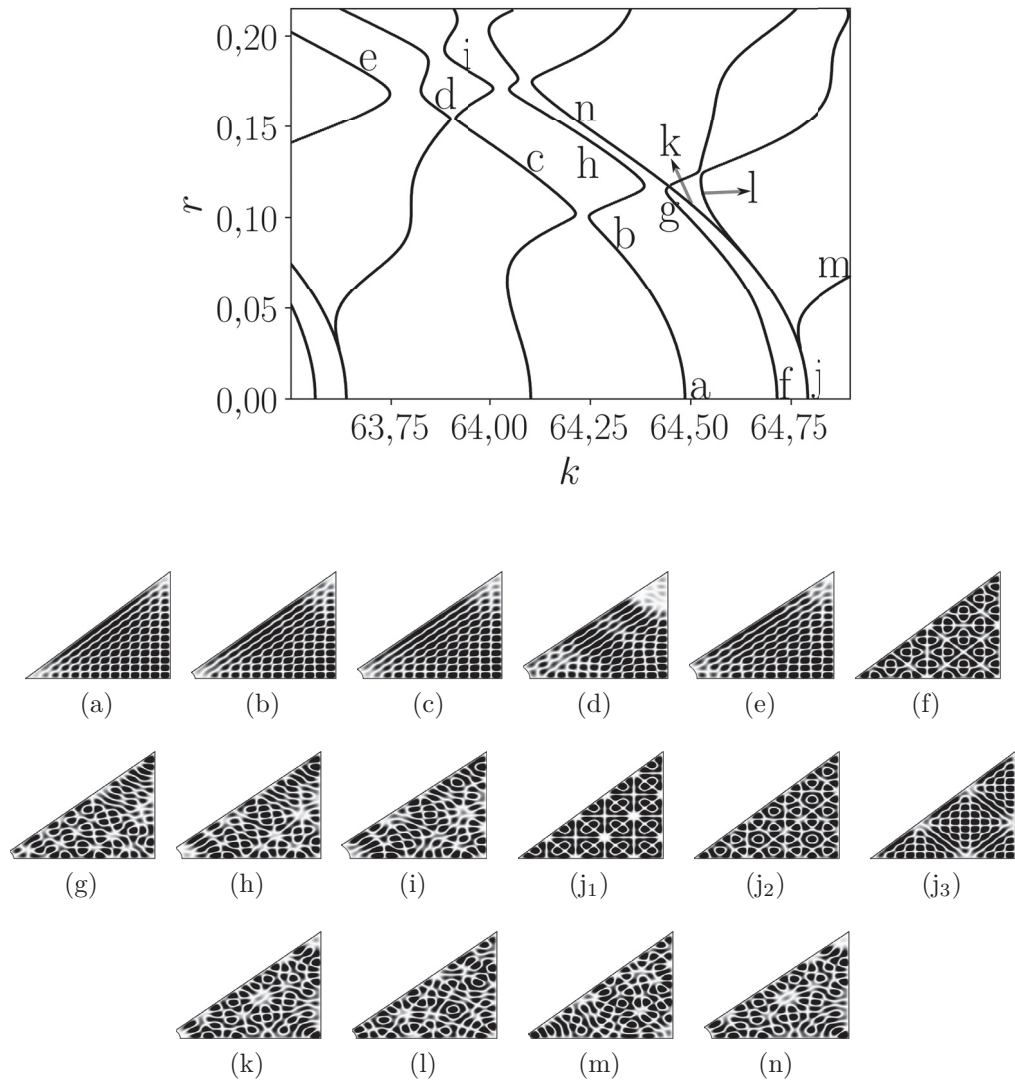


Figura 30 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $r$  para  $\alpha = 45^\circ$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 64,4804$  e  $r = 0,0$ ; (b)  $k = 64,3089$  e  $r = 0,083$ ; (c)  $k = 64,0927$  e  $r = 0,125$ ; (d)  $k = 63,8601$  e  $r = 0,16$ ; (e)  $k = 63,6719$  e  $r = 0,181$ ; (f)  $k = 64,7097$  e  $r = 0,0$ ; (g)  $k = 64,5019$  e  $r = 0,097$ ; (h)  $k = 64,2425$  e  $r = 0,142$ ; (i)  $k = 63,9308$  e  $r = 0,182$ ; (j)  $k = 64,7857$  e  $r = 0,0$ ; (k)  $k = 64,4911$  e  $r = 0,108$ ; (l)  $k = 64,5263$  e  $r = 0,111$ ; (m)  $k = 64,8407$  e  $r = 0,061$ ; (n)  $k = 64,2125$  e  $r = 0,153$  e (o)  $k = 64,0231$  e  $r = 0,189$ .



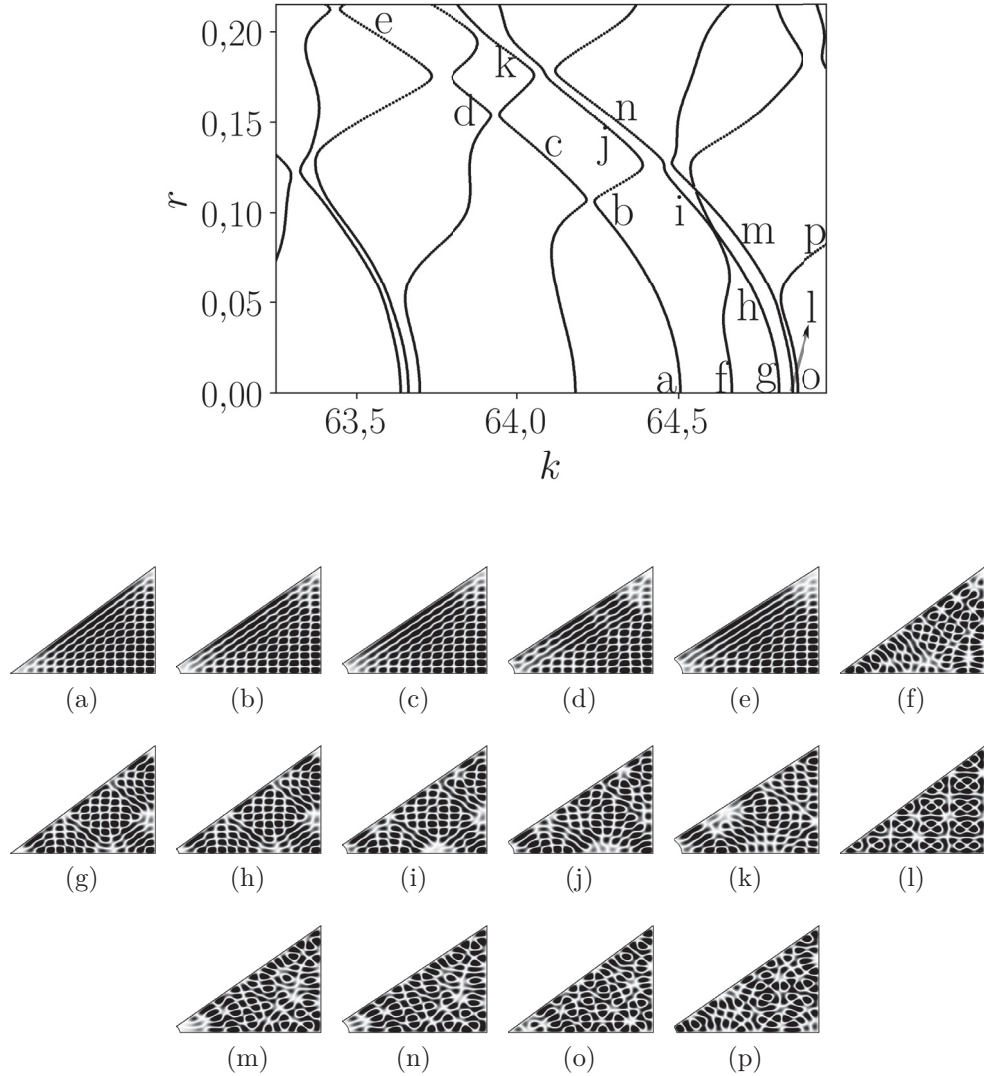


Figura 31 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $r$  para  $\alpha = 46^\circ$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 64,5049$  e  $r = 0,0$ ; (b)  $k = 64,2943$  e  $r = 0,093$ ; (c)  $k = 64,0881$  e  $r = 0,131$ ; (d)  $k = 63,8871$  e  $r = 0,16$ ; (e)  $k = 63,5579$  e  $r = 0,199$ ; (f)  $k = 64,6642$  e  $r = 0,0$ ; (g)  $k = 64,8100$  e  $r = 0,0$ ; (h)  $k = 64,7206$  e  $r = 0,06$ ; (i)  $k = 64,4905$  e  $r = 0,115$ ; (j)  $k = 64,2475$  e  $r = 0,152$ ; (k)  $k = 63,9808$  e  $r = 0,188$ ; (l)  $k = 64,8519$  e  $r = 0,0$ ; (m)  $k = 64,6945$  e  $r = 0,083$ ; (n)  $k = 64,3062$  e  $r = 0,151$ ; (o)  $k = 64,8683$  e  $r = 0,0$  e (p)  $k = 64,9034$  e  $r = 0,075$ .

se separaram nos estados 29(j), 29(m) e 29(o) ao diminuirmos  $\alpha$  e nos estados 31(g), 31(l) e 31(o) ao aumentarmos  $\alpha$ .

Além disso, observamos na figura 32 que os sólitons que se repetem com uma certa frequência estão associados a três estados distintos: 32(a), 32(c) e 32(e). Os dois primeiros são os estados *bouncing ball* (BB), que estão presentes também no espectro para ângulos variáveis, estudados na seção anterior. Vimos que estes estados, quando  $r \neq 0$ , deixam de gerar as estruturas tipo sóliton, logo, a razão para o espectro para  $\alpha = 46^\circ$  possuir um menor número de sólitons é devido ao fato dos estados BB não sobreviverem à variação do

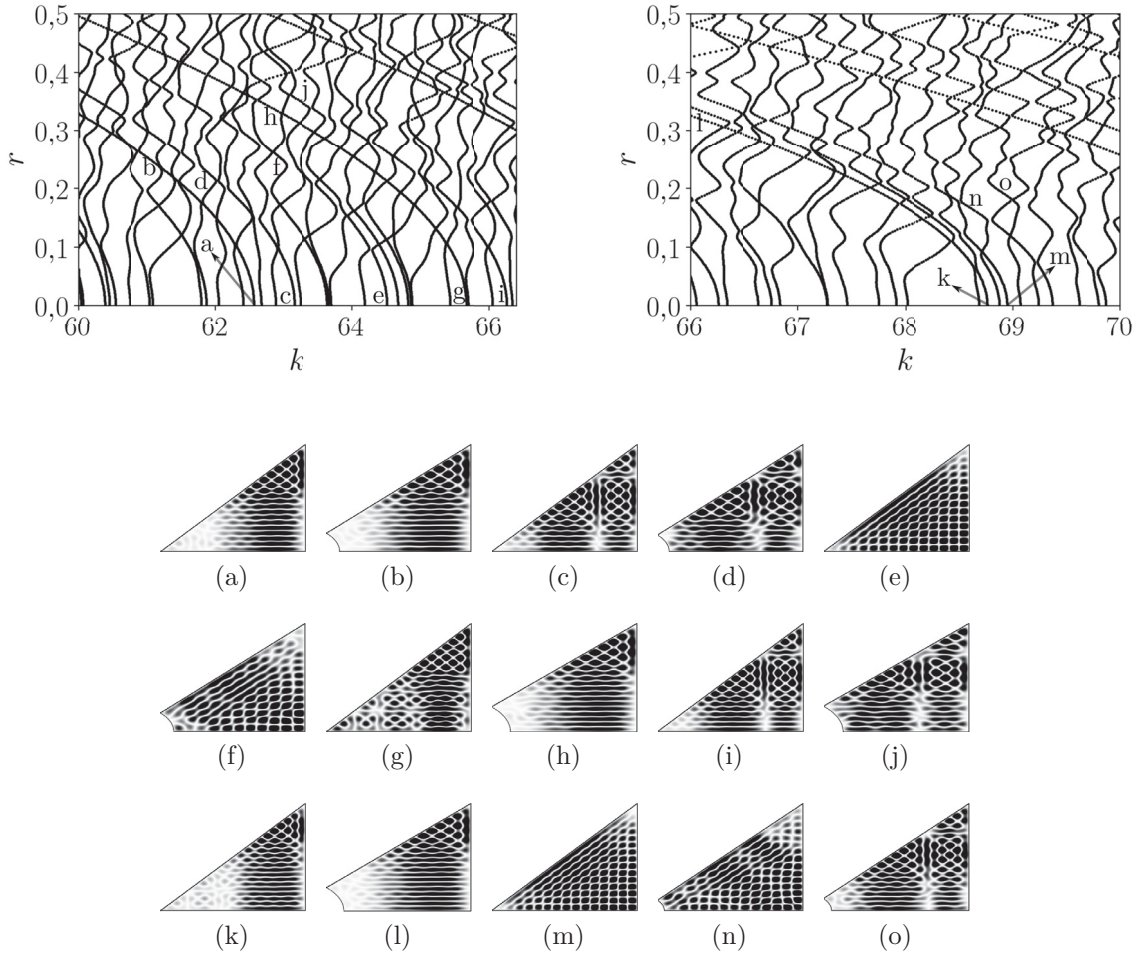


Figura 32 – Gráfico dos picos de  $\langle |T(s_b, s_a)| \rangle$  em função de  $k$  e  $r$  para  $\alpha = 44^\circ$  e gráficos de densidade de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  dos estados indicados para (a)  $k = 62,5537$  e  $r = 0,0$ ; (b)  $k = 61,0551$  e  $r = 0,25$ ; (c)  $k = 63,1409$  e  $r = 0,0$ ; (d)  $k = 61,9060$  e  $r = 0,225$ ; (e)  $k = 64,4997$  e  $r = 0,0$ ; (f)  $k = 62,9360$  e  $r = 0,252$ ; (g)  $k = 65,6466$  e  $r = 0,0$ ; (h)  $k = 62,8059$  e  $r = 0,34$ ; (i)  $k = 66,2509$  e  $r = 0,0$ ; (j)  $k = 63,2426$  e  $r = 0,35$ ; (k)  $k = 68,7584$  e  $r = 0,0$ ; (l)  $k = 66,1361$  e  $r = 0,317$ ; (m)  $k = 68,9415$  e  $r = 0,0$ ; (n)  $k = 68,4090$  e  $r = 0,14$  e (o)  $k = 68,6408$  e  $r = 0,162$ .

raio  $r$  para este valor de  $\alpha$ .

### 3.3 Relação entre os estados cicatrizados e as órbitas periódicas

De todas as observações feitas até aqui, pudemos perceber que todas as soluções para geometrias em torno de  $\alpha = 45^\circ$  e/ou com raios não nulos, são oriundas da evolução das soluções do triângulo retângulo de ângulos  $45^\circ-45^\circ-90^\circ$ , o qual possui solução analítica conhecida, dada por (2.29). Podemos então associar os estados cicatrizados dos bilhares não regulares que dão origem aos sólitons, tanto aos autoestados do triângulo retângulo, como às órbitas periódicas instáveis de seu análogo clássico. Alguns estados cicatrizados e suas respectivas órbitas periódicas estão exibidos na figura 33.

Segundo Heller [43], dado um estado cicatrizado, associado à uma órbita de comprimento  $\mathcal{L}$ , de energia  $E = k^2$ , é esperado que exista uma família de estados cicatrizados da mesma órbita em  $k + 2\pi n/\mathcal{L}$ , com  $n$  inteiro. Logo, o produto do comprimento da órbita com a diferença no número de onda, divididos por  $2\pi$  deve ser um inteiro, isto é

$$n = \frac{\mathcal{L}\Delta k}{2\pi}.$$

Para os estados BB, o comprimento da órbita é igual ao comprimento do lado que a órbita está associada (igual à altura do bilhar, para os casos 33(a) e 33(b) e igual à base do bilhar, para o caso 33(c)). Já para o outro estado cicatrizado, 33(d), o comprimento da órbita é igual ao comprimento da diagonal do bilhar.

Na tabela 1 encontram-se alguns valores de  $n$  para a evolução dos estados BB em função de  $\alpha$  para  $r = 0$  (figura 26(a)). Vemos que para ângulos em torno de  $\alpha = 45^\circ$ ,  $n$  resulta em um número quase inteiro. Para ângulos muito diferentes de  $\alpha = 45^\circ$ ,  $n$  tende a um número não-inteiro, ainda que para os ângulos calculados ele seja bem próximo de um inteiro. Na tabela 2 encontram-se o valor de  $n$  para os outros dois estados cicatrizados, exemplificados nas figuras 33(b) e 33(d). Vemos, novamente, que os valores obtidos estão de acordo com o previsto por Heller [43]. Portanto, este é um modo de verificar se uma determinada órbita é associada a uma certa família de estados cicatrizados.

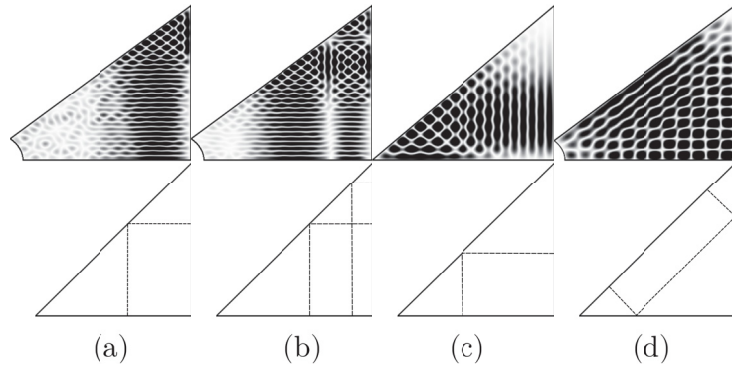


Figura 33 – Estados cicatrizados e suas respectivas órbitas periódicas, indicadas pelas linhas tracejadas nas figuras na linha de baixo.

Tabela 1 – Cálculo de  $n$  para os estados BB para diferentes valores de  $\alpha$  com  $r = 0$ . Os valores de  $k$  são referentes ao espectro exibido na figura 26(a).

$\alpha$ ( $^\circ$ )	$k_1$	$k_2$	$k_3$	$\mathcal{L}$	$n_{12}$	$n_{23}$
41,2	60,8191	63,8014	66,7867	2,1376	1,0146	1,0156
42,4	61,5902	64,6295	67,6568	2,0930	1,0124	1,0084
44,0	62,5592	65,6681	68,7670	2,0352	1,0070	1,0038
45,0	62,9348	66,0767	69,2096	2,0000	1,0001	0,9972
46,4	62,3282	65,4095	68,4908	2,0495	1,0051	1,0051

Tabela 2 – Cálculo de  $n$  para os estados exemplificados nas figuras 33(b) e 33(d) para  $\alpha = 44^\circ$  e  $r = 0$ . Os valores de  $k$  são referentes ao espectro exibido na figura 32.

	$\alpha$ ( $^\circ$ )	$k_1$	$k_2$	$\mathcal{L}$	$n_{12}$
Estado 33(b)	44,0	63,1409	66,2509	2,0352	1,0074
Estado 33(d)	44,0	64,4997	68,9415	2,8293	2,0001

### 3.4 Estatísticas da separação dos níveis de energias vizinhos

Este trabalho esteve focado na relação da morfologia da função de onda dos autoestados com o comportamento dos níveis de energia quando a geometria do bilhar é perturbada. Para tal estudo não é necessária a observação de regiões extensas do espectro, uma vez que as linhas gerais das análises se mantêm independentemente do intervalo de energias observado, e então, não analisaremos em detalhes regiões extensas do espectro. Porém, como complemento à caracterização da dinâmica do bilhar quântico na região de transição entre a dinâmica regular ( $r = 0$  e  $\alpha = 45^\circ$ ) e a dinâmica caótica/mista ( $r \neq 0/\alpha \neq 45^\circ$ ), vamos mostrar as estatísticas da separação dos níveis de energias vizinhos para diferentes valores de  $\alpha$ . Na figura 34 encontram-se tais estatísticas para dois valores de raio:  $r = 0,0$  e  $r = 0,25$ , onde utilizamos 1530 estados para montar os histogramas. Observamos que em todos os casos onde  $r \neq 0$ , isto é, a dinâmica do sistema análogo clássico é caótica, as estatísticas fornecem resultados descritos pela distribuição de Wigner com  $\beta = 1$  em (1.2) (GOE). Já para os casos onde  $r = 0$ , para todos os casos, menos 34(c) ( $\alpha = 45^\circ$ ), a dinâmica clássica é mista e as estatísticas não são descritas nem pela distribuição de Poisson e nem pela distribuição de Wigner. No entanto, podemos quantificá-las utilizando a distribuição de Brody, dada por (1.3). O valor do coeficiente  $q$  varia de 0 a 1, onde  $q = 0$  é a distribuição de Poisson e  $q = 1$  é a distribuição de Wigner. Para  $r = 0$  e  $\alpha = 44^\circ$  e  $\alpha = 46^\circ$ , o valor de  $q$  que melhor ajusta o histograma foi  $q = 0,3386$ . Já para  $r = 0$  e  $\alpha = 44,4^\circ$  e  $\alpha = 45,6^\circ$ , o valor obtido foi de  $q = 0,1875$ . Ou seja, para uma geometria mais perturbada, isto é, ângulos mais “distantes” do ângulo  $45^\circ$ , que é o caso regular, o coeficiente  $q$  apresenta um valor mais próximo de 1 do que para os casos cuja geometria foi menos perturbada. Portanto, podemos dizer que tais sistemas/geometrias apresentam um grau maior de caoticidade quando comparado com os casos mais próximos do regular.

Além disso, para a distribuição de Brody, assim como para a de Wigner,  $P(s) \rightarrow 0$  conforme  $s \rightarrow 0$ , isto é, não há o cruzamento dos níveis de energia. No entanto, como o pico de  $P(s)$  está mais próximo da origem que o pico do GOE, os níveis de energia podem se aproximar mais do que o caso GOE, causando o *sharp avoided crossing*. Para o caso onde  $\alpha = 45^\circ$ , o espectro foi obtido de forma analítica, a dinâmica é regular e as lacunas presentes no histograma são devidas às degenerescências presentes neste caso [16].

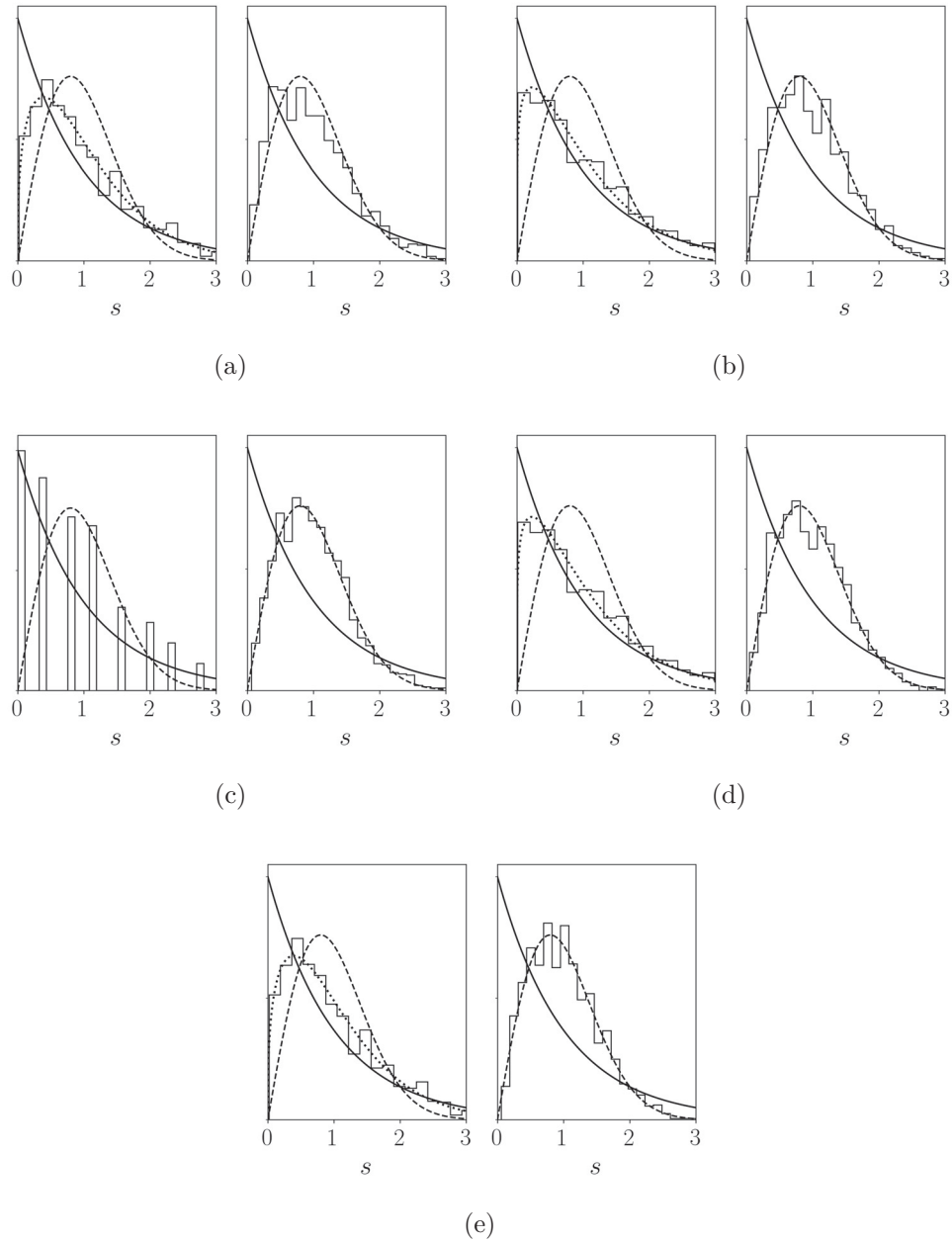


Figura 34 – Estatísticas da separação dos níveis de energia vizinhos para o bilhar de Sinai com  $r = 0$  para os gráficos à esquerda e  $r = 0,25$  para os gráficos à direita com (a)  $\alpha = 44,0^\circ$ ; (b)  $\alpha = 44,4^\circ$ ; (c)  $\alpha = 45,0^\circ$ ; (d)  $\alpha = 45,6^\circ$  e (e)  $\alpha = 46,0^\circ$ . A linha sólida representa a distribuição de Poisson, dada por (1.1), a linha tracejada representa a distribuição de Wigner, dada por (1.2) e a linha pontilhada representa a distribuição de Brody, dada por (1.3) com (a) e (e)  $q = 0,3386$  e (b) e (d)  $q = 0,1875$ .

## 4 Conclusões

O objetivo principal deste trabalho foi estudar a relação da morfologia das autofunções do bilhar de Sinai totalmente dessimetrizado com as estruturas tipo sólitons, que mostram a ligação entre as dinâmicas regular e caótica na região de transição, presentes no seu espectro de energias através da versão numérica do MCP.

No capítulo 2 apresentamos o desenvolvimento analítico do MCP. Primeiramente demonstramos como obter a função de onda  $\psi(\mathbf{r})$  para barreiras permeáveis e impermeáveis. Em seguida, vimos que o MCP gira em torno da introdução da matriz  $T$ , e que através das suas propriedades podemos obter de maneira simples e direta as soluções de espalhamento e os autoestados para regiões fechadas. Na seção 2.3 fizemos o desenvolvimento numérico do MCP, que foi utilizado para todo o trabalho. Por fim, exemplificamos a aplicação do MCP para dois bilhares regulares conhecidos na literatura: o bilhar quadrado e o bilhar triângulo retângulo e mostramos como o MCP pode ser utilizado na otimização de dispositivos coletores de fótons.

No terceiro capítulo aplicamos o MCP para o bilhar de Sinai totalmente dessimetrizado. Analisamos o comportamento do espectro de energias em função dos ângulos internos e do seu raio. Dentre os resultados obtidos podemos destacar o fato de que *todas* as estruturas tipo sóliton são geradas por estados cicatrizados e que cada sóliton tem um comportamento diferente quanto à longevidade. Vimos também que devido à propriedade de defocalização do bilhar de Sinai, os estados *bouncing ball* não sobrevivem para  $\alpha > 45^\circ$  quando o raio é diferente de zero. Além disso, verificamos também que os sólitons reaparecem no espectro com um certo período em  $k$  e que *todas* as soluções do bilhar de Sinai estão associadas às soluções do bilhar triângulo retângulo. Por fim, obtivemos as estatísticas da separação dos níveis de energias vizinhos para diferentes valores de  $\alpha$  e raio, onde verificamos que para  $r \neq 0$  a estatística é descrita pela distribuição de Wigner e que para  $r = 0$  e  $\alpha \neq 45$  a dinâmica clássica é mista e um modo que quantificá-la é utilizando as distribuições intermediárias. Neste caso utilizamos a distribuição de Brody e obtivemos  $q = 0,3386$  para  $r = 0$  e  $\alpha = 44^\circ$  e  $\alpha = 46^\circ$ . Já para  $r = 0$  e  $\alpha = 44,4^\circ$  e  $\alpha = 45,6^\circ$ , obtivemos  $q = 0,1875$ . O valor de  $q$  quantifica o grau de caoticidade, sendo que quanto mais próximo de 1, mais caótico é o sistema.



# REFERÊNCIAS

- 1 ZYCZKOWSKI, K. **Acta Physica Polonica B**, v. 23, p. 245–270, 1992.
- 2 BABELON, O.; BERNARD, D.; TALON, M. **Introduction to classical integrable systems**. Nova York: Cambridge University Press, 2003.
- 3 MUNKRES, J. R. **Elements of algebraic topology**. Florida: CRC Press, 2018.
- 4 RICHENS, P.; BERRY, M. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 2, n. 3, p. 495, 1981.
- 5 LICHTENBERG, A. J.; LIEBERMAN, M. A. **Regular and stochastic motion**. Nova York: Springer Science & Business Media, 2013. v. 38.
- 6 SINAI, Y. G. **Introduction to ergodic theory**. Nova Jersey: Princeton University Press, 1976. v. 18.
- 7 BUNIMOVICH, L. **Mathematics of the USSR-Sbornik**, v. 23, n. 1, p. 45, 1974.
- 8 GUTKIN, E. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 19, n. 3, p. 311, 1986.
- 9 HENYEY, F. S.; POMPHREY, N. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 6, n. 1, p. 78, 1982.
- 10 BISWAS, D. **Physics Letters A**, v. 159, n. 1-2, p. 28, 1991.
- 11 DAHLQVIST, P. **Nonlinearity**, v. 10, n. 1, p. 159, 1997.
- 12 ARTUSO, R.; CASATI, G.; GUARNERI, I. **Physical Review E**, v. 55, n. 6, p. 6384, 1997.
- 13 SHUDO, A.; SHIMIZU, Y. **Physical Review A**, v. 42, n. 10, p. 6264, 1990.
- 14 ŠĚBA, P. **Physical Review Letters**, v. 64, n. 16, p. 1855, 1990.
- 15 ALT, H. et al. **Physical Review E**, v. 60, n. 3, p. 2851, 1999.
- 16 AGUIAR, F. D. **Physical Review E**, v. 77, n. 3, p. 036201, 2008.
- 17 STÖCKMANN, H.-J.; STEIN, J. **Physical Review Letters**, v. 64, n. 19, p. 2215, 1990.
- 18 SRIDHAR, S. **Physical Review Letters**, v. 67, n. 7, p. 785, 1991.
- 19 GRÄF, H.-D. et al. **Physical Review Letters**, v. 69, n. 9, p. 1296, 1992.
- 20 STEIN, J.; STÖCKMANN, H.-J. **Physical Review Letters**, v. 68, n. 19, p. 2867, 1992.
- 21 MEHTA, M. L. **Random matrices**. São Diego: Elsevier, 2004. v. 142.

- 22 GUHR, T.; MÜLLER-GROELING, A.; WEIDENMÜLLER, H. A. **Physics Reports**, v. 299, n. 4-6, p. 189, 1998.
- 23 BOHIGAS, O.; GIANNONI, M.-J.; SCHMIT, C. **Physical Review Letters**, v. 52, n. 1, p. 1, 1984.
- 24 WIGNER, E. P. Characteristic vectors of bordered matrices with infinite dimensions i. In: **The Collected Works of Eugene Paul Wigner**. Estados Unidos da América: Springer, 1993. p. 524–540.
- 25 BERRY, M. V.; TABOR, M. **Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences**, v. 356, n. 1686, p. 375, 1977.
- 26 WANG, S.-J.; CHU, S. **Physical Review A**, v. 47, n. 5, p. 3546, 1993.
- 27 BERRY, M. V.; ROBNIK, M. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 17, n. 12, p. 2413, 1984.
- 28 BRODY, T. **Lettere Al Nuovo Cimento (1971–1985)**, v. 7, n. 12, p. 482, 1973.
- 29 PERCIVAL, I. **Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics**, v. 6, n. 9, p. L229, 1973.
- 30 NOID, D. et al. **The Journal of Chemical Physics**, v. 72, n. 11, p. 6169, 1980.
- 31 PECHUKAS, P. **Physical Review Letters**, v. 51, n. 11, p. 943, 1983.
- 32 YUKAWA, T. **Physical Review Letters**, v. 54, n. 17, p. 1883, 1985.
- 33 GASPARD, P.; RICE, S.; NAKAMURA, K. **Physical Review Letters**, v. 63, n. 9, p. 930, 1989.
- 34 TAKAMI, T.; HASEGAWA, H. **Physical Review Letters**, v. 68, n. 4, p. 419, 1992.
- 35 VERGINI, E.; WISNIACKI, D. **Physical Review E**, v. 58, n. 5, p. R5225, 1998.
- 36 LITTMAN, M. G. et al. **Physical Review Letters**, v. 36, n. 14, p. 788, 1976.
- 37 ZIMMERMAN, M. L.; CASTRO, J. C.; KLEPPNER, D. **Physical Review Letters**, v. 40, n. 16, p. 1083, 1978.
- 38 BAUER, E.; FISHER, E.; GILMORE, F. **The Journal of Chemical Physics**, v. 51, n. 10, p. 4173, 1969.
- 39 SIMMEL, F.; ECKERT, M. **Physical Review E**, v. 51, n. 6, p. 5435, 1995.
- 40 ZANETTI, F. M.; LUZ, M. G. E. da. **The European Physical Journal B**, v. 85, n. 6, p. 202, 2012.
- 41 ZAKRZEWSKI, J.; DELANDE, D.; KUŚ, M. **Physical Review E**, v. 47, n. 3, p. 1665, 1993.
- 42 YANG, X.; BURGDÖRFER, J. **Physical Review A**, v. 48, n. 1, p. 83, 1993.
- 43 HELLER, E. J. **Physical Review Letters**, v. 53, n. 16, p. 1515, 1984.



- 
- 44 O'CONNOR, P. W.; HELLER, E. J. **Physical Review Letters**, v. 61, n. 20, p. 2288, 1988.
- 45 HELLER, E. J.; O'CONNOR, P. W.; GEHLEN, J. **Physica Scripta**, v. 40, n. 3, p. 354, 1989.
- 46 SABAEIAN, M.; KHALEDI-NASAB, A. **Applied Optics**, v. 51, n. 18, p. 4176, 2012.
- 47 KHALEDI-NASAB, A. et al. **Journal of Optics**, v. 16, n. 5, p. 055004, 2014.
- 48 MURRAY, C. B.; KAGAN, a. C.; BAWENDI, M. **Annual Review of materials science**, v. 30, n. 1, p. 545, 2000.
- 49 SRIDHAR, S.; HOGENBOOM, D.; WILLEMSSEN, B. A. **Journal of statistical physics**, v. 68, n. 1-2, p. 239, 1992.
- 50 BITTNER, S. et al. **Physical Review Letters**, v. 108, n. 2, p. 024101, 2012.
- 51 ROMANOV, S. **Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters**, v. 79, n. 12, p. 614, 2004.
- 52 CROMMIE, M. F.; LUTZ, C. P.; EIGLER, D. M. **Science**, v. 262, n. 5131, p. 218, 1993.
- 53 CROMMIE, M. et al. **Physica D: Nonlinear Phenomena**, v. 83, n. 1-3, p. 98, 1995.
- 54 FRANCS, G. C. des et al. **Physical Review Letters**, v. 86, n. 21, p. 4950, 2001.
- 55 SALGER, T. et al. **Science**, v. 326, n. 5957, p. 1241, 2009.
- 56 DREXLER, C. et al. **Nature nanotechnology**, v. 8, n. 2, p. 104, 2013.
- 57 BERRY, M. V.; WILKINSON, M. **Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences**, v. 392, n. 1802, p. 15, 1984.
- 58 KAUFMAN, D. L.; KOSZTIN, I.; SCHULTEN, K. **American Journal of Physics**, v. 67, n. 2, p. 133, 1999.
- 59 LUZ, M. D.; LUPU-SAX, A.; HELLER, E. **Physical Review E**, v. 56, n. 3, p. 2496, 1997.
- 60 KATINE, J. et al. **Physical Review Letters**, v. 79, n. 24, p. 4806, 1997.
- 61 ZANETTI, F. et al. **Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics**, v. 42, n. 2, p. 025402, 2008.
- 62 MACEDO, A. et al. **Journal of Applied Physics**, v. 104, n. 3, p. 033714, 2008.
- 63 VAISHNAV, J.; ITSARA, A.; HELLER, E. **Physical Review B**, v. 73, n. 11, p. 115331, 2006.
- 64 VAISHNAV, J. et al. **Physical Review A**, v. 76, n. 1, p. 013620, 2007.

- 65 GARCIA-GRACIA, H.; GUTIÉRREZ-VEGA, J. C. **Physical Review E**, v. 86, n. 1, p. 016210, 2012.
- 66 ZANETTI, F.; VICENTINI, E.; LUZ, M. da. **Annals of Physics**, v. 323, n. 7, p. 1644, 2008.
- 67 NUNES, A.; ZANETTI, F.; LYRA, M. **Annals of Physics**, v. 373, p. 707–716, 2016.
- 68 ARFKEN, G.; WEBER, H. H. **Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física**. Rio de Janeiro: Elsevier, 2007.
- 69 NEUMANN, J. von; WIGNER, E. P. Über merkwürdige diskrete eigenwerte. In: **The Collected Works of Eugene Paul Wigner**. Berlin: Springer, 1993. p. 291–293.
- 70 STILLINGER, F. H.; HERRICK, D. R. **Physical Review A**, v. 11, n. 2, p. 446, 1975.
- 71 CHABANOV, V.; ZAKHARIEV, B.; AMIRKHANOV, I. **Annals of Physics**, v. 285, n. 1, p. 1, 2000.
- 72 SAKURAI, J. J.; NAPOLITANO, J. et al. **Modern quantum mechanics**. Estados Unidos da América: Pearson Harlow, 2014. v. 185.
- 73 INGANÄS, O.; ROMAN, L. S. Organic photodiodes: From diodes to blends. In: **Organic Photovoltaics**. [S.l.]: Springer, 2003. p. 249–272.
- 74 TANG, C. W. **Applied physics letters**, v. 48, n. 2, p. 183, 1986.
- 75 PETTERSSON, L. A.; ROMAN, L. S.; INGANÄS, O. **Journal of Applied Physics**, v. 86, n. 1, p. 487, 1999.
- 76 PEUMANS, P.; BULOVIĆ, V.; FORREST, S. R. **Applied Physics Letters**, v. 76, n. 19, p. 2650, 2000.
- 77 ZENER, C. **Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character**, v. 137, n. 833, p. 696, 1932.